

**Analytische und numerische Untersuchungen  $\mathbb{Z}_2$ - und  
 $O(2)$ -symmetrischer Modelle: Linked Cluster  
Entwicklung, Renormierungsgruppe und kritische  
Exponenten**

Johannes Göttker-Schnetmann  
2000



**Analytische und numerische Untersuchungen  $\mathbb{Z}_2$ - und  
 $O(2)$ -symmetrischer Modelle: Linked Cluster Entwicklung,  
Renormierungsgruppe und kritische Exponenten**

Theoretische Physik



Theoretische Physik

**Analytische und numerische Untersuchungen  $\mathbb{Z}_2$ - und  
 $O(2)$ -symmetrischer Modelle: Linked Cluster  
Entwicklung, Renormierungsgruppe und kritische  
Exponenten**

Inaugural-Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von  
Johannes Göttker-Schnetmann  
aus Münster

2000

Dekan:

Prof. Dr. W. Lange

Erster Gutachter:

Prof. Dr. G. Münster

Zweiter Gutachter:

Priv.Doz. Dr. habil. C. Wieczorkowski

Tag der mündlichen Prüfungen:

Tag der Promotion:





---

## Inhaltsverzeichnis

---

<b>1. Einleitung . . . . .</b>	<b>1</b>
1.1 Quantenfeldtheorie . . . . .	1
1.2 Statistische Physik und Euklidische QFT . . . . .	6
1.3 Renormierungsgruppe . . . . .	7
1.4 Berechnung . . . . .	8
1.5 Daten . . . . .	10
1.6 Aufbau der Arbeit . . . . .	10
<b>2. Das Modell . . . . .</b>	<b>13</b>
2.1 Kontinuumsmodelle . . . . .	13
2.1.1 Kanonische Quantisierung . . . . .	14
2.1.2 Pfadintegralquantisierung . . . . .	16
2.2 Gittermodelle . . . . .	20
2.2.1 Ising-Modell . . . . .	20
2.2.2 Gitter-Feldtheorie . . . . .	21
2.3 Interessierende Größen . . . . .	24
2.3.1 Physikalische Kopplungen . . . . .	25

2.3.2	Suszeptibilitäten . . . . .	27
2.3.3	Kritische Phänomene . . . . .	29
2.4	Physikalische Systeme . . . . .	30
<b>3.</b>	<b>Die Cluster-Entwicklung . . . . .</b>	<b>31</b>
3.1	Die Situation . . . . .	32
3.2	Entwicklungen . . . . .	33
3.3	Linked Cluster Entwicklung . . . . .	34
3.3.1	Die ultralokale Theorie . . . . .	36
3.3.2	Linked Cluster Entwicklung: Beispiel . . . . .	40
3.4	Berechnung der Reihenkoeffizienten für die $N$ -Komponenten-Theorie .	45
3.4.1	Regeln für die LCE für Modelle mit $N$ Komponenten . . . . .	45
3.5	Renormierte Linked Cluster Entwicklung . . . . .	46
3.6	Linked Cluster Entwicklung der Suszeptibilitäten und der physikalischen Kopplungen . . . . .	47
3.6.1	1PI-Suszeptibilitäten . . . . .	48
<b>4.</b>	<b>Kombination mit der Renormierungsgruppe . . . . .</b>	<b>51</b>
4.1	Die zugrundeliegende Idee . . . . .	51
4.2	Die Durchführung: Vergleich mit der Monte-Carlo Renormierungsgruppe . . . . .	52
4.3	Definition der RG-Transformation . . . . .	53
4.4	Skalenrelationen . . . . .	59
4.4.1	Skalenrelation der $n$ -Punkt-Suszeptibilitäten $\chi_n$ . . . . .	61
4.4.2	Skalenrelation von $\mu_2$ . . . . .	61
4.5	Homomorphe Interpolation der RG-Transformation . . . . .	63
4.5.1	Interpolation für die ungewichteten Suszeptibilitäten . . . . .	64
4.5.2	Interpolation für $\mu_2$ . . . . .	65
4.6	Skalenrelationen der renormierten Kopplungen . . . . .	68
4.6.1	Fluß der nackten Kopplungen . . . . .	68

---

<b>5. Erzeugung und Auswertung der Flußdaten . . . . .</b>	71
5.1 Die Situation und Ziele der Untersuchung . . . . .	71
5.2 Implementation und Konsistenztests . . . . .	73
5.2.1 Abstand von der kritischen Linie . . . . .	73
5.2.2 Genauigkeit der Inversion . . . . .	74
5.2.3 Kombination von RG-Schritten . . . . .	76
5.2.4 Qualitatives Verhalten der Flußlinien . . . . .	76
5.3 Flußbilder . . . . .	77
5.4 Weitere systematische Fehler . . . . .	77
5.5 Lokalisierung des Fixpunktes . . . . .	80
5.5.1 Lineare Extrapolation: 1d-Fall . . . . .	85
5.5.2 Lineare Extrapolation: 2d-Fall . . . . .	86
5.5.3 Resultat dieser Überlegungen . . . . .	88
5.6 Renormierte Trajektorie . . . . .	88
5.6.1 Vergleich mit anderen Resultaten . . . . .	90
5.7 Kritische Exponenten . . . . .	91
5.7.1 Naive Berechnung . . . . .	91
5.7.2 Linearisisierung der Abbildung $(\kappa, \lambda) \rightarrow (\kappa', \lambda')$ . . . . .	92
5.8 Rechenzeiten . . . . .	96
5.9 $N = 2$ . . . . .	97
5.9.1 Genauigkeit der Inversion . . . . .	97
5.9.2 Flußbilder und systematische Fehler . . . . .	97
5.9.3 Lokalisierung des Fixpunktes . . . . .	99
5.9.4 Kritischer Exponent . . . . .	100
<b>6. Résumé . . . . .</b>	103
<b>A. Maße auf Funktionenräumen . . . . .</b>	107
A.1 Grundbegriffe der Maßtheorie . . . . .	108

A.2	Operatorkerne und stochastische Prozesse . . . . .	110
A.3	Projektiver Limes von Maßen . . . . .	113
A.4	Maße auf Hilberträumen . . . . .	115
A.5	Maße auf Banachräumen . . . . .	117
<b>B.</b>	<b>Graphologie . . . . .</b>	121
<b>C.</b>	<b>Skalenrelationen . . . . .</b>	123
C.1	Die gewichtete Suszeptibilität $\mu_2$ . . . . .	123
C.2	1PI-Suszeptibilitäten und renormierte Kopplungen . . . . .	131
C.2.1	Renormierte Kopplungen . . . . .	133
<b>D.</b>	<b>Dokumentation der Programme . . . . .</b>	135
D.1	LCE-Programme . . . . .	135
D.2	RG-Fluss . . . . .	136
D.2.1	Flußverfolgung . . . . .	139
D.3	Kritische Exponenten . . . . .	139
<b>E.</b>	<b>Ergebnisse der numerischen Rechnungen . . . . .</b>	143
E.1	Verletzung der Skalenrelation . . . . .	143
E.1.1	$N = 1$ . . . . .	143
E.1.2	$N=2$ . . . . .	146
E.2	Systematische Fehler . . . . .	147
E.2.1	$N = 1$ . . . . .	147
E.2.2	$N = 2$ . . . . .	149
E.3	Flüsse . . . . .	151
E.3.1	$N = 1$ . . . . .	151
E.3.2	$N = 2$ . . . . .	160
<b>F.</b>	<b>Notation . . . . .</b>	163
	<b>Literaturverzeichnis . . . . .</b>	165

# KAPITEL 1

---

## Einleitung

---

### 1.1 Quantenfeldtheorie

Die Quantenfeldtheorie ist heute mehr als sechs Jahrzehnte alt<sup>1</sup>. Dennoch stellt sie sich nicht als zusammenhängende Theorie dar und auch ihr Anwendungsbereich ist im Laufe der Zeit immer wieder verschoben oder erweitert worden. Ursprünglich als Theorie zur Beschreibung der Elementarteilchen gedacht wird sie inzwischen auch zur Berechnung von Phänomenen der Festkörperphysik und von Phasenübergängen verwendet. Sowohl phänomenologische Aspekte als besonders auch ihre mathematischen Grundlagen und die Untersuchung effizienter Methoden zur Berechnung gegebener Fragestellungen sind weiterhin interessante Forschungsgebiete.

Zur Quantenfeldtheorie (QFT) gibt es viele Zugänge. Anfangs wurde vor allem die Störungstheorie als Werkzeug benutzt. Dieser Aspekt der QFT ist zusammen mit den graphischen Methoden, den Feynman-Diagrammen, mit denen diese Entwicklungen systematisch durchgeführt werden, inzwischen so verbreitet, daß er gelegentlich synonym für sie verwendet wird. Mit dem Versuch, die Produkte operatorwertiger Distributionen und Pfadintegrale auch mathematisch sauber zu definieren, gab es verschiedene Entwicklungen wie etwa die konstruktive Feldtheorie und funktionalanalytischen Arbeiten. Die Literatur ist sehr umfassend, so daß stellvertretend auf [BLT75, Riv91, GJ87, Cao99] und die Zitate hierin verwiesen sei. Im Rah-

---

<sup>1</sup> Häufig wird 1927 als Geburtsjahr der Theorie genannt: P.A.M. Dirac *Proc. Roy. Soc. A* **114** 243 (1927), A **114**, 710 (1927)

men der algebraischen oder axiomatischen Feldtheorie wird die allgemeine Struktur von Quantenfeldtheorien untersucht. Ausgehend von „Axiomen“, d.h. erwünschten Eigenschaften der Objekte der Theorie, werden allgemein gültige Fakten bewiesen [SW64, Haa93, BSZ91]. Ein großer Erfolg der algebraischen Feldtheorie ist der Beweis des Zusammenhangs zwischen Spin und Statistik.

Seit einiger Zeit ist zu beobachten, daß gewisse Gebiete der mathematischen und theoretischen Physik im Bereich der QFT und Gebiete der Mathematik sich wieder aneinander annähern und es im Grenzgebiet interessante gegenseitige Anregungen gibt. So gibt es Zusammenhänge von Eichtheorien mit mathematischen Forschungsgebieten, wie etwa der Knotentheorie und der Topologie im Allgemeinen [BM94, Wit89]. Auch die Untersuchung von  $C^*$ -Operatoralgebren verlief in der Physik und der Mathematik zum Teil parallel.

Diese vielen verschiedenen Ansätze wurden auch deswegen entwickelt, weil sich diese komplexe Theorie noch einige Jahrzehnte nach ihrer Entstehung einer exakten Definition entzieht und daher immer wieder neue Ansätze ausprobiert und erforscht werden.

*„At the level of mathematical technology, the subject involves Hilbert space and geometry, wave equations and group representations, operator algebra and functional integration, to mention only the most basic components. At the level of practical applications, much of physical quantum field theory is heuristic and somewhat opportunistic, even if it is strongly suggestive of an underlying distinctive and coherent mathematical structure. At the overall foundational level, the logical basis of the subject remains unsettled, more than six decades after its heuristic origin. There is not even a general agreement as to what constitutes a quantum field theory, in precise terms“* [BSZ91, Introduction].

In der algebraischen Feldtheorie geht man nicht von einer klassischen Theorie aus, sondern behandelt gleich Quanten-Feldtheorien. Man untersucht VON NEUMANN-Algebren, die als Operator-Algebren von Observablen in Raumzeitgebieten in Frage kommen [Buc98]. Die Algebren, die man durch Zugrundelegen der kanonischen Kommutator- und Antikommutatorrelationen erhält, sind hiervon Spezialfälle.

Im Rahmen des Operator- und Pfadintegralformalismus startet man mit einer klassischen Feldtheorie, auf die man eine Quantisierungsvorschrift anwendet. Das Hauptaugenmerk bei der Definition der Theorie liegt dabei im Gegensatz zur algebraischen Feldtheorie auf „Quantenfeldern“, die durch die Quantisierung aus den klassischen Feldern hervorgehen. Dieses Verfahren wird aus der Sicht der algebraischen Feldtheorie manchmal als künstlich betrachtet, weil die Quantenfeldtheorie als die grundlegendere Theorie angesehen wird und daher ohne Bezug auf eine klassische Theorie definierbar sein sollte [Sch98, Haa93].

Es gibt verschiedene solcher Quantisierungsvorschriften und es ist vom betrachteten System abhängig, welche anwendbar und praktikabel ist. Heute ist die Quantisierung über Pfadintegrale vor allem wegen der leichteren Handhabbarkeit bei Eichtheorien weit verbreitet. Schon zur Jahrhundertwende hat der Mathematiker Wiener ähnliche Fragestellungen untersucht. In die Physik wurde dieses Verfahren von Feynman, basierend auf Ideen von Dirac, eingeführt [Fey48, Fey49b, Fey49a, Fey50, FH65]. Die in der Quantenmechanik auftretenden Maße wurden von Kac mathematisch genauer untersucht. Diese Entwicklung mündete in der Entdeckung des Feynman-Kac-Maßes im Rahmen der Quantenmechanik [Sim79].

Für die Berechnung von Experimenten der Hochenergiephysik betrachtet man typischerweise als Idealisierung freie Teilchen als Anfangszustände, die sich dann einander annähern, wechselwirken und Endprodukte bilden, die nach genügend langer Zeit wieder als freie Teilchen anzusehen sind. Man interessiert sich nun für die Übergangsamplituden  $\langle b, \text{out} | a, \text{in} \rangle$  von den Anfangs- in die Endzustände, um aus ihnen die Wahrscheinlichkeiten für diese Übergänge zu gewinnen. Mit der Reduktionsformel von Lehmann, Symanzik und Zimmermann kann man diese Amplituden durch die Greenschen Funktionen der Theorie ausdrücken. Die Greenschen Funktionen sind die Vakuum-Erwartungswerte der zeitgeordneten Produkte der wechselwirkenden Felder. Für eine einfache Theorie skalarer Felder sind diese Funktionen von der Form  $\langle 0 | T\varphi(y_1) \dots \varphi(y_n) | 0 \rangle$ , die sich aber auf andere Fälle verallgemeinern lässt. Die Gell-Mann–Low-Formel erlaubt nun zumindest störungstheoretisch, Greensche Funktionen durch Erwartungswerte der freien Felder auszudrücken.

Man betrachtet üblicherweise das erzeugende Funktional

$$Z(J) := \langle 0 | T \exp(i \int d^d x \varphi(x) J(x)) | 0 \rangle$$

der Greenschen Funktionen der Theorie, aus dem man durch funktionale Ableitung nach der „Quelle“  $J$  und nullsetzen derselben die Greenschen Funktionen wieder erhalten kann. Für dieses erzeugende Funktional kann man dann mit Hilfe formaler Argumente, die analog zur ursprünglichen Argumentation in der Quantenmechanik verlaufen, die „Pfadintegraldarstellung“

$$Z(J) = \int \mathcal{D}\varphi \exp(iS(\varphi) + i \int \varphi(x) J(x) dx) \quad (1.1)$$

finden. „ $\mathcal{D}\varphi$ “ wird dabei als eine Art „Lebesgue-Maß“ auf dem Raum aller Felder angenommen.  $S(\varphi)$  ist die klassische Wirkung des Feldes  $\varphi$ , gegeben durch das Integral über die Lagrangefunktion. Mit diesem formalen Konstrukt kann man nun unter Annahme gewisser Rechenregeln, die man von gewöhnlichen Integralen übernimmt, Beziehungen für die Greenschen Funktionen herleiten und versuchen, diese zu berechnen.

Die Wirkung setzt sich aus einem Teil, der freie Felder beschreibt, und einem Restterm, dem Wechselwirkungsterm, zusammen. Zu einem freien Feld gehört eine Wirkung, die quadratisch im Feld ist. Spaltet man diesen Teil ab, so bekommt man eine Exponentialfunktion mit einem im Feld quadratischen Argument. Dies ist formal ein Gauß-Integral, wobei es die zusätzliche Komplikation gibt, daß der Exponent imaginär ist. Man berechnet solche Pfadintegrale auf formal die gleiche Art, wie entsprechende Gauß-Integrale im  $\mathbb{R}^n$ . Daher ist die Berechnung eines Gauß-Integrals über einen Wechselwirkungsterm zu lösen. Man betrachtet den Wechselwirkungsterm als kleine Störung, entwickelt die Exponentialfunktion und vertauscht die formale Integration mit der Summation. Die entstehenden Terme sind Erwartungswerte bezüglich eines Gauß-Maßes und lassen sich mit Hilfe des Wick-Theorems berechnen. Physikalisch betrachtet man dabei einen Fock-Raum freier Teilchen, wobei der Wechselwirkungsterm Übergänge zwischen den verschiedenen Teilchenzuständen verursacht. So erhält man Ausdrücke für die Greenschen Funktionen, die man mit Hilfe von Lebesgue-Integralen berechnen kann.

Dabei stößt man bald auf das Problem, daß die Integrale, die die Greenschen Funktionen definieren, nicht konvergieren. Man argumentiert, daß dies physikalisch Divergenzen sind, die schon in der klassischen Theorie auftreten, wenn man Selbstwechselwirkungen berechnet [Fey49a, SW64, Sch98].

Bei einer großen Klasse von Quantenfeldtheorien kann man dieses Problem aber beheben, indem man in die ursprüngliche Lagrangedichte Gegenterme einfügt, die diese Divergenzen formal aufheben, so daß die Resultate endlich werden. Mit dieser Methode hat man in der Quantenelektrodynamik hervorragende Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten erzielt und auch im Rahmen der elektroschwachen Wechselwirkung und gewisser Bereiche der starken Wechselwirkung gibt es zur Zeit kein Experiment, das den so berechneten Resultaten widerspricht, wenn man den Gültigkeitsbereich der berechneten Resultate beachtet, der sich auf schwache Kopplungen beschränkt.

Man kann auch die Störungstheorie gleich so anlegen, daß keine divergenten Terme auftreten, indem man das Problem der Multiplikation von Distributionen (eigentlich: Distributionsdichten) genauer analysiert und Kausalitätsargumente verwendet. Man findet, daß die Multiplikation von Distributionen nicht eindeutig ist, sondern je nach Situation eine ganze Schar von Distributionen als Produkt in Frage kommt. Die Auswahl einer dieser Distributionen entspricht den Renormierungsbedingungen aus dem „naiven“ Ansatz. Dieses Programm geht auf Stueckelberg und Bogoliubov und ihre jeweiligen Mitarbeiter zurück und wurde von Epstein und Glaser erfolgreich durchgeführt [EG73, Sch89].

Es ist aber fragwürdig, ob die so erhaltenen Störungsreihen konvergieren, und es gibt gute Argumente dafür, daß sie höchstens asymptotische Reihen sein können, wie man für bosonische Theorien nachgewiesen hat [Jaf65]. Zudem gibt es Anzeichen

dafür, daß gewisse Fragen im Rahmen der Störungstheorie nicht zu beantworten sind. Dazu gehört die Frage nach dem Confinement von Quarks im Rahmen der Quantenchromodynamik. Man sucht also nach Alternativen und insbesondere nach Möglichkeiten der direkten Berechnung von Pfadintegralen.

Die heuristische Idee bei der Untersuchung mit Hilfe von Pfadintegralen ist, daß jede mögliche Pfad- bzw. Feldkonfiguration mit einer gewissen komplexen Phase zum erzeugenden Funktional beiträgt. Selbst wenn man die Probleme des Lebesgue-Maßes auf unendlichdimensionalen Räumen als gelöst betrachtet, so gibt es doch Probleme, weil der Integrand immer vom Betrag 1 ist. Diese Probleme werden z.B. in [AHK76] behandelt.

Man benutzt für mathematisch solide Zugänge daher auch häufig die euklidische Formulierung, bei der man eine Wick-Rotation der Zeit zu rein imaginären Werten durchführt. Die Greenschen Funktionen werden dabei in der euklidischen Situation berechnet. Der Übergang von der euklidischen Formulierung zu der minkowskischen Formulierung wird durch Forderungen an die Greenschen Funktionen der euklidischen Theorie sichergestellt. Diese Forderungen werden die Osterwalder-Schrader Axiome genannt [OS73]. Die so gewonnenen Greenschen Funktionen der minkowskischen Theorie erfüllen die Wightman-Axiome, die ihrerseits die Rekonstruktion des physikalischen Hilbertraumes mit allen erwünschten Eigenschaften ermöglichen.

In der euklidischen Formulierung ist ein Pfadintegral über einen exponentiell abfallenden Integranden zu definieren. Hier übernehmen Gauß-Maße auf Funktionsräumen bzw. Distributionenräumen, die zu freien Quantenfeldtheorien gehören, die Aufgabe der Lebesgue-Maße, die auf unendlichdimensionalen Räumen nicht existieren<sup>2</sup> [Roe91, Fre85, Sim79, GJ87, Kuo75, Sko74]. Man gewinnt so die Methoden der Maßtheorie als Hilfsmittel. Die Greenschen Funktionen sind in der euklidischen Formulierung die Gewichte des Maßes.

Es gibt einen grundlegenden Zusammenhang zwischen linearen<sup>3</sup> partiellen Differentialgleichungen, Pfadintegralen und stochastischen Prozessen [Fre85], [Bau91, §51 4.]. Die mathematische Theorie liefert eine stochastische Mikrostruktur, die zu der Differentialgleichung gehört. Für eindimensionale Prozesse, die benutzt werden, um z.B. die Brownsche Molekularbewegung zu modellieren, ist dies bereits zu Beginn des 20. Jahrhunderts durch Wiener untersucht worden. Zu den Pfadintegralen solcher Prozesse gehören Diffusionsgleichungen. Auch das Feynman-Kac-Maß ist von diesem Typ.

---

<sup>2</sup> Beim Lebesgue-Maß fordert man bekanntlich Translationsinvarianz, aber sogar die schwächere Forderung eines lediglich rotationsinvarianten Maßes ist auf unendlichdimensionalen Räumen nicht zu erfüllen.

<sup>3</sup> In der Quantenmechanik ist die Schrödinger-Gleichung linear. Zu wechselwirkenden Quantenfeldtheorie gehören nichtlineare Evolutionsgleichungen, wie sie schon bei einer der einfachen wechselwirkenden Theorien, der  $\phi^4$ -Theorie, auftreten.

Die Differentialgleichungen, die formal zu den Maßen der euklidischen QFT gehören, sind nicht linear. In der konstruktiven Feldtheorie werden u.a. die Existenz und die physikalischen Eigenschaften dieser Maße untersucht [CI73, MTV99]. Es ist in einigen meist niedrigdimensionalen Fällen gelungen [Sim74], die Maße wechselwirkender Theorien auf eine auch mathematisch befriedigende Weise zu konstruieren. In vielen physikalisch interessanten Fällen ist die Konstruktion der Maße noch nicht gelungen.

Zusammenfassend ist festzustellen, daß die algebraische oder auch abstrakte QFT heute einer der grundlegendsten Ansatzpunkte zum Verständnis der Struktur von Quantenfeldtheorien ist. Sie ermöglicht die mathematisch solide Untersuchung der Theorien im Minkowski-Raum. Der euklidische Zugang ist für die konstruktive QFT von großer Bedeutung, da mit der Maß- und Wahrscheinlichkeitstheorie neue Werkzeuge zur Verfügung stehen. Auf der anderen Seite vereinfacht die Kommutativität der Felder die Konstruktion und auch die konkrete Berechnung. Die Interpretation als statistische Theorie wiederum bedeutet, daß man feldtheoretische Methoden auch in der statistischen Physik verwenden kann, etwa bei der Berechnung von Phasenübergängen. Ferner ist dieser Zusammenhang mit stochastischen Prozessen bzw. der statistischen Physik die Grundlage für Gittersimulationen, welche heute wichtige Beiträge bei der Erforschung nichtperturbativer Eigenschaften von Quantenfeldtheorien leisten.

## 1.2 Statistische Physik und Euklidische QFT

In der statistischen Physik untersucht man Methoden, um das statistische Verhalten von Systemen mit einer großen Zahl von Freiheitsgraden anhand von Gesetzen vorherzusagen, die für die mikroskopischen Bestandteile gelten.

Man unterscheidet zwischen statistischer Quantenphysik und klassischer statistischer Physik. In der statistischen Physik sucht man eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem Phasenraum, die die vorgegebenen Erwartungswerte reproduziert, aber möglichst wenig zusätzliche Information enthält. Dazu maximiert man die Informationsentropie unter den vorgegebenen Informationen. Bei gegebenen Erwartungswert der inneren Energie erhält man einen Lagrange-Parameter  $\beta$ , den man mit  $(k_B T)^{-1}$  identifiziert. Man kommt so zu der Wahrscheinlichkeitsdichte für klassische Systeme

$$p(s) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta \mathcal{H}(s)) ,$$

wenn  $s \in S$  ein möglicher Zustand des Systems,  $S$  die Menge aller Zustände und  $\mathcal{H}$  die Hamiltonfunktion des Systems ist.  $Z(\beta)$  ist die kanonische Zustandssumme

$$Z(\beta) = \sum_{s \in S} \exp(-\beta \mathcal{H}(s)) .$$

In der statistischen Physik ist das grundlegende Problem, die Zustandssumme zu berechnen, weil sich weitere Größen von ihr ableiten lassen. Der Erwartungswert der inneren Energie ist die Ableitung von  $\log Z(\beta)$  und die freie Energie ist  $-\frac{1}{\beta} \log Z(\beta)$ . Mit den thermodynamischen Relationen zwischen den thermodynamischen Größen und Potentialen erhält man so die interessierenden Größen.

In der euklidischen Formulierung der QFT besteht ein enger Zusammenhang mit der klassischen statistischen Mechanik [Sym66, Sym69, Nel73]. Das erzeugende Funktional (1.1) hat nach Wick-Rotation die Form

$$Z_E(J) = \int \mathcal{D}\varphi \exp(-S_E(\varphi) + \int \varphi(x)J(x)dx) . \quad (1.2)$$

Erwartungswerte bzw. Korrelationsfunktionen erhält man durch Ableitungen nach  $J$ , so daß man analog zur statistischen Physik

$$p(\varphi) = \frac{1}{Z_E(0)} \exp(-S_E(\varphi))$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren kann.

Auch in der statistischen Physik interessiert man sich für Korrelationsfunktionen. Sie spielen bei Streuungen eine Rolle, z.B. bei der Streuung von Neutronen an magnetischen Systemen. Man betrachtet daher auch in der statistischen Physik erzeugende Funktionen, indem man zu der Zustandssumme einen Term hinzufügt, der die Berechnung von Korrelationsfunktionen durch Ableiten erlaubt. Er hat wie in der QFT die Form einer Kopplung an ein äußeres Feld.

Betrachtet man die statistische Physik kontinuierlicher Medien, etwa fluktuiender Grenzflächen, so ist die erzeugende Funktion von der gleichen Form wie diejenige einer euklidischen Quantenfeldtheorie. Lediglich die Menge an Funktionen bzw. Distributionen, über die integriert wird, unterscheidet sich. Man hat es dann bei der Berechnung der Zustandssumme und der Erwartungswerte mit euklidischen Pfadintegralen zu tun. Wenn man umgekehrt eine euklidische QFT diskretisiert, d.h. man untersucht die QFT nicht auf einer vierdimensionalen Raumzeit, sondern auf einem vierdimensionalen Gitter, so entspricht die zugehörige erzeugende Funktion der eines magnetischen Systems.

### 1.3 Renormierungsgruppe

Die Untersuchungsmethoden, die mit „Renormierungsgruppe“ (RG) bezeichnet werden, wurden sowohl in der Feldtheorie als auch in der statistischen Physik entwickelt. In der QFT findet man tatsächlich eine abelsche Gruppe. In der von Kadanoff und Wilson entwickelten Form hat man mathematisch betrachtet typischerweise eine

Halbgruppe. Allerdings ist nicht diese mathematische Struktur die physikalisch interessante Idee. Diese Untersuchungsmethoden sind aus Sicht der Physik eher ein allgemeines Konzept, das man an die konkrete Situation anpassen muß und dessen Implementierung bereits vor der konkreten Berechnung von Größen Einsicht in die physikalische Struktur der Situation erfordert [WK74, BG95]. In der statistischen Physik integriert man kurzwellige Freiheitsgrade aus und erhält eine effektive Theorie auf einer größeren Längenskala. Man erzielt so eine Reduktion der Komplexität der Theorie. Dieser Ansatz wird typischerweise in Situationen benutzt, in denen man näherungsweise Skaleninvarianz hat, wobei hier die Universalität auf großen Längenskalen zu finden ist. Diese Methoden sind z.B. auch in der Untersuchung der Turbulenz anwendbar, wobei dann die Skaleninvarianz auf der kleinen, aber noch nicht atomaren, Längenskala zu finden ist. Skaleninvariante Situationen gehören zu Fixpunkten der jeweiligen Renormierungsgruppentransformation.

Um die Zustandssumme in der statistischen Physik zu berechnen, muß man die Terme der Zustandssumme finden, die große Beiträge liefern. Im Fall stark oder schwach gekoppelter Systeme gibt es konvergente Entwicklungen um den entkoppelten bzw. vollständig gekoppelten Fall, die beide exakt lösbar sind. Die Korrelationslänge des Systems gibt an, über welche Längenskala Freiheitsgrade gekoppelt sind. Je größer die Korrelationslänge wird, desto mehr Freiheitsgrade sind bei der Berechnung zu berücksichtigen. In der Nähe des kritischen Punktes divergiert die Korrelationslänge schließlich. Ein Problem bei der Behandlung fast kritischer und kritischer Theorien ist daher die große Anzahl von Freiheitsgraden innerhalb eines Volumens mit Abmessungen von der Größe der Korrelationslänge. Dadurch sind die oben angesprochenen Methoden nicht oder nur mit Schwierigkeiten anwendbar.

Mit Hilfe der Renormierungsgruppe ersetzt man eine Theorie der statistischen Physik durch eine effektive Theorie, indem man Freiheitsgrade ausintegriert, die zu kurzwelligen Fluktuationen gehören. In der Block-Spin-Version teilt man das Gitter in  $d$ -dimensionale Hyperwürfel mit einer Kantenlänge ein, die ein Vielfaches der Gitterkonstante ist, und mittelt das Feld über diese Hyperwürfel. Hatte man vorher eine „fast kritische“ Theorie, so hat man anschließend eine effektive Theorie, die „weniger kritisch“ ist, da die Korrelationslänge in Einheiten der Gitterkonstante kleiner ist.

## 1.4 Berechnung

*„You see, we’re in a funny position: It’s not that we’re looking for the theory, we’ve got the theory – a good, good candidate – but we’re in the step in the science that we need to compare the theory to experiment by seeing what the consequences are and checking it. We’re stuck in seeing what the consequences are, and it’s my aim, it’s my desire to see if I can“*

*work out a way to work out what the consequences of this theory are. It's kind of a crazy position to be in, to have a theory that you can't work out the consequences of ... I can't stand it, I have to figure it out. Someday, maybe.“*

R. P. Feynman, The pleasure of finding things out, transcript of an interview made for the BBC television program *Horizon* in 1981.

Ist man vor das Problem gestellt, eine konkrete Fragestellung mit Hilfe der QFT zu lösen, so muß man sich entscheiden, welche Sichtweise man einnimmt und welche Methoden man verwendet. Auch wenn man einen pragmatischen Standpunkt einnimmt und Pfadintegrale als gegeben hinnimmt, so stellt sich doch bald die Frage, wie man sie berechnen kann.

Man kann auf der einen Seite auf die mathematische Theorie kontinuierlicher stochastischer Prozesse zurückgreifen. Allerdings stehen als konkret untersuchte Maße meist nur Gauß-Maße zur Verfügung, so daß man eine freie Theorie mit einem Wechselwirkungsterm betrachten muß.

Auf der anderen Seite kann man Pfadintegrale über Gittermodelle definieren und berechnen. Das Problem der Berechnung von Funktionalintegralen wird auf die Berechnung hochdimensionaler Integrale zurückgeführt. Man hat es wieder mit einem diskreten statistischen System zu tun und kann alle Verfahren anwenden, die für solche Systeme zur Verfügung stehen [MM94].

Anschließend kann man dann den UV-Grenzwert (Volumengrenzwert) und den IR-Grenzwert (Grenzwert kleiner Gitterkonstante) untersuchen. Bei diesen Betrachtungen findet man einige Probleme der entsprechenden Kontinuumstheorie wieder, wenn man naiv von Beginn an davon ausgeht, daß alle Begriffe bereits definiert sind und die Rechenregeln für Lebesgue-Integrale gelten. So zeigt sich, daß für die Durchführung dieser Grenzwerte bestimmte Parameter in der ursprünglichen Theorie angepaßt werden müssen, damit sie existieren. Manche Theorien haben keinen „nichttrivialen“ Grenzwert, d.h. einen Grenzwert, der einer wechselwirkenden Theorie entspricht.

Der Zugang über Gittermodelle hat der theoretischen Physik das weite Feld der Monte-Carlo-Simulationen auf dem Gitter eröffnet. Gelegentlich wird dies, neben der theoretischen Physik und der Experimentalphysik, als dritter Zweig der modernen theoretischen Physik bezeichnet.

In dieser Arbeit wird der euklidische Zugang über Gittermodelle untersucht. Als Werkzeug wird die Clusterentwicklung („linked cluster expansion“, kurz LCE) benutzt [Wor74, Bry84, LW87, LW88b, LW88a, KP86, Dob96, BC97].

## 1.5 Daten

In dieser Arbeit wird untersucht, ob man mit einer Kombination der konvergenten Linked Cluster Entwicklung mit Renormierungsgruppenmethoden Aussagen über kritische Größen machen kann und wie gut dieses Verfahren im Vergleich zu anderen Verfahren ist.

Das Paradigma im Rahmen kritischer Phänomene ist die RG-Theorie, insbesondere die Theorie der Universalität des kritischen Verhaltens und die Einteilung der Materialien und Theorien in Universalitätsklassen. Man benötigt die möglichst genaue Bestimmung kritischer Exponenten zur Überprüfung dieses Paradigmas. Eine Definition der Universalitätsklasse ist, daß die kritischen Exponenten für alle Mitglieder gleich sind. Kritische Exponenten werden experimentell gemessen und auf verschiedene Arten aus der Theorie berechnet. Die Berechnung der kritischen Exponenten ist mit einem Aufwand verbunden und es ist nicht leicht, eine Genauigkeit von vielen Stellen zu erreichen. Wie man der Tabelle entnehmen kann, sind 3 signifikante Nachkommastellen ein gutes Ergebnis.

Man nimmt heute an, daß die Universalitätsklassen durch die Anzahl der mikroskopischen Freiheitsgrade ( $N$ ), ihre Symmetriegruppe und die Dimension des Systems gegeben ist. Bei der  $(N = 1, d = 3)$ -Universalitätsklasse ist die Theorie an Genauigkeit dem Experiment voraus. Durch ein auf dem Space Shuttle durchgeführtes Experiment [LSN<sup>+</sup>96] wurde jetzt die Genauigkeit der kritischen Exponenten des  $\lambda$ -Überganges von  ${}^4He$  gesteigert, über die Genauigkeit der theoretischen Werte der Universalitätsklasse ( $d = 3, N = 2$ ) hinaus, zu der dieser Phasenübergang der Theorie nach gehört.

Methoden, mit denen kritische Exponenten berechnet werden, sind die Störungstheorie (meist mit Resummationsverfahren wie der Borel-Summation), Hochtemperaturrentwicklungen (mit Extrapolation, da der Konvergenzbereich sich nicht über die kritische Linie erstreckt), Monte-Carlo-Rechnungen (unter Berücksichtigung des finite-size scalings, da man mit endlichen Gittern rechnen muß) und Kombinationen mit Renormierungsgruppenmethoden. Mit diesen Ergebnissen soll das Ergebnis dieser Arbeit verglichen werden. Weiterhin kann man diese Daten als den roten Faden ansehen, an dem sich die Rechnungen orientieren.

## 1.6 Aufbau der Arbeit

Diese Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut. In Kapitel 2 werden die verschiedenen Modelle erläutert, die mit den später vorgestellten Methoden behandelbar sind. Kapitel 3 ist eine allgemeine Einführung in die Methode der Clusterentwicklung.

	Typ	$N = 0$	$N = 1$	$N = 2$	$N = 3$	$N = 4$
[CBS79]	exp.	-	0.625(6)	-	-	-
[WKS94]	exp.	-	0.621(3)	-	-	-
[HKFK89]	exp.	-	0.627(6)	-	-	-
[BLH95]	MC	-	0.6301(8)	-	-	-
[HPV98]	MC	-	0.6298(5)	-	-	-
[BFMM <sup>+</sup> 99]	MC	-	0.6294(10)	-	-	-
[CPRV99b]	iHT	-	0.63002(23)	-	-	-
[Rei95b]	HT	-	0.6301(18)	0.6734(28)	0.7131(40)	0.7361(68)
[SCL92]	exp.	-	-	0.6708(4)	-	-
[GA92]	exp.	-	-	0.6705(6)	-	-
[LSN <sup>+</sup> 96]	exp.	-	-	0.67095(13)	-	-
[HT99]	MC	-	-	0.6723(3)[8]	-	-
[Kle99]	ST	-	-	0.6707(3)	-	-
[CPRV99a]	iHT	-	-	0.67166(55)	-	-

Tab. 1.1: Experimentelle und theoretische Werte von  $\nu$  für  $d = 3$  (exp. = experimentell, MC = Monte Carlo, ST = Störungstheorie, HT = Hochtemperaturrentwicklung, iHT = improved HT). Zusammenfassungen von Resultaten findet man auch in [GZJ98, JK99], viele experimentelle Resultate sind in [BLH95] zusammengetragen. Die experimentellen Werte [WKS94, HKFK89] sind [BLH95] entnommen, wobei als Auswahlkriterium die kleinsten Fehlerbalken gewählt wurden. Allerdings ist der Wert von  $\nu$  in [WKS94] unter den in [BLH95] zitierten Werten besonders niedrig und stimmt nicht innerhalb der Fehlerbalken mit neuen Monte-Carlo Werten überein.

	Typ	$N = 0$	$N = 1$	$N = 2$	$N = 3$	$N = 4$
[CBS79]	exp.	-	0.017(15) – 0.030(25)	-	-	-
[HKFK89]	exp.	-	0.016(5)	-	-	-
[BLH95]	MC	-	0.037(3)	-	-	-
[HPV98]	MC	-	0.0366(8)	-	-	-
[BFMM <sup>+</sup> 99]	MC	-	0.0374(12)	-	-	-
[CPRV99b]	iHT	-	0.0364(4)	-	-	-
[HT99]	MC	-	-	0.0381(2)[2]	-	-
[CPRV99a]	HT	-	-	0.0381(3)	-	-

Tab. 1.2: Experimentelle und theoretische Werte von  $\eta$  für  $d = 3$ .

Diese Methode ist die Grundlage der weiteren Berechnungen. In Kapitel 4 werden Renormierungsgruppenmethoden mit der Clusterentwicklung kombiniert und die Grundlagen der Berechnung kritischer Größen besprochen. Kapitel 5 stellt die numerische Implementation, zusammen mit numerischen Resultaten vor.

# KAPITEL 2

---

## Das Modell

---

*Our intuition of time and space has apparently been shaped by evolution – millions of years of African primate ancestry – and by personal experience. This intuition is a remarkably effective tool. That it can be trained to become a sophisticated logical instrument is even more remarkable (and, from an evolutionary viewpoint, somewhat mysterious). Training is however needed. We cannot hope that the old ape in us, clever as he may be, has direct comprehension of abstract physical or mathematical questions.*

D. Ruelle [Rue82]

### 2.1 Kontinuumsmodelle

Die QFT wurde ursprünglich als Kontinuumsmodell formuliert. Diese Formulierung ist allerdings mit Schwierigkeiten verbunden, die es schwer machen, den Gleichungen einen mathematischen Sinn zu geben. Daher werden Kontinuumsmodelle häufig mit Methoden untersucht, die von einem mathematischen Standpunkt aus betrachtet heuristisch sind.

Man modelliert die Raumzeit in diesem Fall durch den  $\mathbb{R}^4$  bzw.  $\mathbb{R}^d$  mit zusätzlicher Struktur. Diese resultiert aus dem Nahwirkungsprinzip zusammen mit den Ergebnissen der speziellen Relativitätstheorie: Die Endlichkeit der maximalen Ausbreitungsgeschwindigkeit von physikalischen Effekten und der Invarianz unter der Lorentzgruppe. In der klassischen Physik wird dazu jeder Punkt der Raumzeit als

mit dynamischen Variablen ausgestattet betrachtet. Der Raum nimmt also an den physikalischen Prozessen teil und die so definierten „Felder“ vermitteln die physikalischen Effekte zwischen den Materieteilchen. Die Mannigfaltigkeit von Ereignissen ist mit einer lorentzschen Metrik versehen und wird so zu einer lorentzschen Mannigfaltigkeit. Die Metrik ist durch die Matrix

$$\mathbf{g} = \text{diag}(1, -1, \dots, -1)$$

gegeben.

Materieteilchen mit der Ruhemasse  $m$  haben nach der speziellen Relativitätstheorie die Beziehung  $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$  zwischen Energie, Impuls und Ruhemasse. Die Klein-Gordon-Gleichung erhält man daraus mit der üblichen Ersetzung von  $E$  und  $\vec{p}$  durch Differentialoperatoren.

$$(\hbar^2 \Delta - \hbar^2 \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - m^2 c^2) \phi = (-\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu - m^2 c^2) \phi = 0$$

Lösungen von ihr sind Wellenfunktionen deren Energie-Impuls-Beziehung von der gleichen Form wie bei Materieteilchen ist. In natürlichen Einheiten hat sie mit  $\square = -\partial_\mu \partial^\mu$  die Form

$$(\square - m^2) \phi = 0 .$$

Die Lagrange-Funktion zu dieser Gleichung lautet

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} ((\partial_\mu \phi)(\partial^\mu \phi) - m^2 \phi^2)$$

und für die Wirkung erhält man damit

$$S = \frac{1}{2} \int d^d x (\partial_\mu \phi(x) \partial^\mu \phi(x) - m^2 \phi^2(x)) .$$

### 2.1.1 Kanonische Quantisierung

Die kanonische Quantisierungsvorschrift ist, statt klassischer Felder *Quantenfelder* zu betrachten. Man fordert für die kanonisch konjugierten Variablen zu einer gewissen Zeit Kommutatorregeln, deren Form man analog zum Kommutator von Orts- und Impulsoperator der Quantenmechanik wählt

$$\begin{aligned} [\Phi(t, \mathbf{x}), \Pi(t, \mathbf{y})] &= i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ [\Phi(t, \mathbf{x}), \Phi(t, \mathbf{y})] &= 0 \\ [\Pi(t, \mathbf{x}), \Pi(t, \mathbf{y})] &= 0 \end{aligned}$$

Die Dynamik soll dann wieder durch die Bewegungsgleichung gegeben sein.

An der Nichtkommutativität der Quantenfelder einerseits und an der auftretenden „Dichte“ der Distribution  $\delta$  bzw.  $\Delta$  andererseits sieht man, daß die Quantenfelder bei dieser Art der Quantisierung Distributionen mit nichtkommutierenden Dichten sind. Die Nichtkommutativität wird wie in der Quantenmechanik so interpretiert, daß die Felder Operatoren auf einem Hilbertraum sind. Der Definitionsbereich der Operatoren und der Distributionen müsste dabei noch festgelegt werden, wie z.B. im Rahmen der Wightman-Axiome [SW64].

Die Interpretation als Distribution bedeutet genauer, daß man die Quantenfelder als Abbildungen von einem Funktionenraum in einen Raum von Operatoren betrachtet. Für zwei Testfunktionen  $f$  und  $g$  ist also  $\Phi(f, t)$  und  $\Pi(g, t)$  ein Operator und  $\Phi(t, \mathbf{x})$  bzw.  $\Pi(t, \mathbf{x})$  sind die formalen Integralkerne der Abbildung  $f \mapsto \Phi(f, t)$  bzw.  $g \mapsto \Pi(g, t)$ . Formal hat man also

$$\Phi(f, t) = \int d\mathbf{x} \Phi(t, \mathbf{x}) f(\mathbf{x}) .$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} [\Phi(f, t), \Pi(g, t)] &= \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} [\Phi(t, \mathbf{x}), \Pi(t, \mathbf{y})] f(\mathbf{x}) g(\mathbf{y}) \\ &= \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{x}) g(\mathbf{y}) \\ &= i \int f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = i \langle f, g \rangle . \end{aligned}$$

D.h. die Operatoren vertauschen, wenn die Träger der Funktionen  $f, g$  disjunkt sind.

Das Differenzieren von Distributionsdichten ist durch formale partielle Integration definiert. Es gilt bei geeigneten Bedingungen an die Testfunktionen

$$\int ((\square - m^2)\Phi(x)) f(x) dx = \int \Phi(x)(\square - m^2)f(x) dx .$$

Man sucht also Distributionen, für die für alle  $f$  im Definitionsbereich

$$\Phi((\square - m^2)f) = 0$$

gilt.

Die Quantisierung nichtlinearer Wellengleichungen stößt damit auf ein Problem. Für die klassische  $\phi^4$ -Theorie mit Wirkung

$$S(\phi) = \int \left( \phi(x)(\square - m^2)\phi(x) - \frac{g}{4!}\phi(x)^4 \right) dx$$

lautet die Wellengleichung mit Selbstwechselwirkung

$$(\square - m^2)\phi(x) = \frac{g}{3!}\phi(x)^3 .$$

Die entsprechende Gleichung für Distributionen ist formal

$$\Phi((\square - m^2)f) = \frac{g}{3!} \int \Phi(x)^3 f(x) dx ,$$

aber die Multiplikation von Distributionsdichten auf der rechten Seite ist i.a. nicht wohldefiniert. Die Theorie der Distributionen ist allerdings u. a. für die Lösung *linearer* inhomogener Differentialgleichungen entwickelt worden, so daß diese Schwierigkeiten nicht ganz unerwartet kommen.

## 2.1.2 Pfadintegralquantisierung

Im Prinzip gibt es die gleichen Schwierigkeiten bei der Pfadintegralquantisierung. Für euklidische Raumzeiten lassen sich so freie Felder ebenfalls mathematisch solide quantisieren. Wechselwirkende Felder sind im gleichen Formalismus betrachtet dagegen zunächst problematisch.

Das heuristische Vorgehen ist, das Pfadintegral zur Raumzeit mit lorentzscher Metrik zu betrachten und eine Wick-Rotation der Zeit zu rein imaginären Werten durchzuführen. Durch den Übergang zum Pfadintegral werden die Operatoren aus der Theorie eliminiert und durch die Wick-Rotation kann man dem Pfadintegral für nicht wechselwirkende Felder mathematisch einen Sinn geben.

Dieses Vorgehen führt dahin, statt der klassischen Felder nun Distributionen

$$\begin{aligned} \phi : \mathcal{F} &\rightarrow \mathbb{R} \\ f &\mapsto \phi(f) \end{aligned}$$

zu einem Raum  $\mathcal{F}$  von Testfunktionen zu betrachten, die auf der euklidischen Raumzeit definiert sind. Jedes  $\phi(f)$  wird als Zufallsvariable betrachtet und man sucht ein geeignetes Zufallsmaß auf dem Raum der Distributionen. Die euklidische Wirkung ist

$$S(\phi) = \int \left( \partial\phi(x)\partial\phi(x) + m^2\phi(x)^2 + \frac{g}{4!}\phi(x)^4 \right) dx$$

und man sucht Maße, die formal die Form

$$e^{-S(\phi)} \prod_x d\phi(x) \tag{2.1}$$

haben.

Dieser Ausdruck kann nicht wörtlich genommen werden. Für den nicht wechselwirkenden Fall  $g = 0$  lassen sich aber für den Gesamtausdruck Gauß-Maße auf dem Raum  $\mathcal{S}'$  der temperierten Distributionen über das Bochner-Minlos-Theorem angeben. Dies sind Maße, die formal die Form

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \exp \left( -\frac{1}{2} (\phi, (-\Delta + m^2)^{-1} \phi) \right) \prod_x d\phi(x) \quad (2.2)$$

haben. Um die mathematischen Probleme bei diesem Vorgehen zu verstehen, muß man sich zunächst klar machen, welche die Definitionsmengen der Maße sind (Anhang A). Mit Hilfe von Satz A.5 erhält man den folgenden Spezialfall.

**Satz 2.1 (Spezialfall von Bochner-Minlos)** [Riv91]

Sei  $B : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$  eine positiv semi-definite, stetige Bilinearform. Dann existiert aufgrund von Satz A.5 zum erzeugenden Funktional

$$\hat{\mu}(f) := e^{-\frac{1}{2}B(f,f)}$$

ein Gaußsches Zylindermaß auf  $\mathcal{S}'$ , dessen Kovarianz  $B$  ist.

Wählt man

$$B(f, g) = \langle f, Cg \rangle = \langle f, (-\Delta + m^2)g \rangle = \left( \int_{\mathbb{R}^d} f(x)(-\Delta + m^2)g(x)dx \right),$$

so hat man ein Maß  $\mu$ , das zur freien Feldtheorie gehört. Es ist auf dem Raum der temperierten Distributionen definiert. Ein solches Maß wird mit  $d\mu_C(\phi)$  bezeichnet, wenn  $C = (-\Delta + m^2)^{-1}$  der Kovarianzoperator ist. Die lineare bzw. nicht-(selbst-)wechselwirkende Theorie ist also mathematisch zu fassen.

Man möchte nun ein Maß konstruieren, das der  $\phi^4$ -Theorie entspricht. Formal soll das Maß die Form

$$d\nu(\phi) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{g}{4!} \int \phi(x)^4 dx} d\mu_C(\phi) \quad (2.3)$$

haben, wobei  $Z$  eine Normierungskonstante ist, die  $\int d\nu(\phi) = 1$  sicherstellt, also  $Z = e^{-\frac{g}{4!} \int \phi(x)^4 dx} d\mu_C(\phi)$ .

Für die Konstruktion von Maßen auf unendlichdimensionalen Räumen gibt es in der Wahrscheinlichkeitstheorie verschiedene Möglichkeiten. Man kann z.B. die charakteristische Funktion des Maßes konstruieren oder man gibt das Maß als Grenzwert von Maßen auf endlichdimensionalen Räumen an. Ein besonders einfacher Fall ist, wenn man das Maß durch eine Dichte bezüglich eines anderen Maßes angeben kann. Dies macht man formal in Gleichung (2.1) bzw. (2.2) bzgl. des „Lebesgue-Maßes“ und in (2.3) bzgl. des Gauß-Maßes.

Im Hinblick auf den Versuch der Definition über (2.3) hat man nun wieder das Problem, daß das Produkt von Distributionsdichten i.a. nicht wohldefiniert ist. Zum anderen stellt bei der Integration von Produkten von Distributionsdichten mit Testfunktionen

$$\phi(f) = \int d^d x \phi(x) f(x)$$

der Raum der Testfunktionen sicher, daß die Integrale konvergieren. Selbst wenn man das Problem der Definition des Produktes  $\phi(x)^4$  von Distributionen also gelöst hätte, so gibt es das zweite Problem, daß das Integral

$$\int \phi(x)^4 dx$$

nicht konvergiert, wenn die Dichte nicht rasch genug abfällt. Diese beiden Probleme bezeichnet man als Ultraviolett- und als Infrarot-Problem.

Eine andere Sichtweise des UV-Problems ist, daß  $\phi(x)$  für  $\phi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$  keine Zufallsvariable bzgl. des Maßes  $\mu_C$  ist, da die Abbildung  $\phi \mapsto \phi(x)$  nicht meßbar ist. Da die Zufallsvariablen durch die Testfunktionen indiziert sind, sind Abbildungen der Form  $\phi \mapsto \phi(f)$  für  $f \in \mathcal{S}$  zu betrachten. Um formal  $\phi(f) = \phi(x)$  zu erhalten, müßte man eine  $\delta$ -Distribution für den Punkt  $x$  einsetzen, die aber nicht zum Definitionsbereich von  $\phi$  gehört:

$$\phi(\delta_x) = \int \phi(y) \delta_x(y) dy = \int \phi(y) \delta(y - x) dy = \phi(x)$$

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, dieses Problem zu beheben. Man kann mit einem anderen Maß starten, so daß der Träger des Maßes sich auf Distributionen beschränkt, für die die benutzten Operationen zulässig sind. In [Riv91, S. 24 ff.] wird ein Maß definiert, das seinen Träger auf Distributionen hat, deren Dichten Funktionen mit zusätzlichen Regularitätseigenschaften sind. Eine zweite Möglichkeit der Definition der wechselwirkenden Theorie ist, eine Folge  $(\delta_{n,x})_{n \in \mathbb{N}}$  von Funktionen in  $\mathcal{S}$  zu wählen, die eine Darstellung der  $\delta$ -Distribution ergibt und die Maße

$$d\nu_{C,n}(\phi) = \frac{1}{Z_n} e^{-\frac{g}{4!} \int \phi(\delta_{n,x})^4 dx} d\mu_C(\phi)$$

zu betrachten. Der Grenzwert des Maßes  $d\nu_{C,n}$  für  $n \rightarrow \infty$  existiert normalerweise, wie oben betrachtet, nicht und das Infrarotproblem besteht weiter. Beschränkt man sich zusätzlich auf ein endliches Volumen, was man ebenfalls über die Wahl einer geeigneten Testfunktion erreichen kann, so daß  $\phi(\delta_{n,V,x}) = 0$  für  $x \notin V$  ist, so ist auch das Infrarotproblem zunächst behoben. Das Ultraviolett- und das Infrarotproblem haben jetzt die neue Gestalt, die Grenzwerte  $n \rightarrow \infty$  und  $V \rightarrow \infty$  in geeigneter Form durchzuführen. Da diese Grenzwerte naiv nicht existieren, wird

man i.a. weitere Parameter in die Theorie einführen müssen, die von den „Cutoffs“  $n$  und  $V$  abhängen. Man betrachtet also Maße

$$d\nu_{C,n,V}(\phi) = \frac{1}{Z_{n,V}} e^{-\frac{g}{4!} \int \phi(\delta_{n,V,x})^4 dx} d\mu_C(\phi)$$

mit zusätzlichen Parametern, die von  $n$  und  $V$  abhängen.

Physikalisch verletzt eine solche Theorie die Osterwalder-Schrader-Axiome. Der Volumen-Cutoff verletzt die Euklidische Invarianz und der UV-Cutoff die Reflektions-Positivität. Man muß die Grenzwerte also durchführen, wenn man an einer Theorie interessiert ist, die die Osterwalder-Schrader-Axiome erfüllt.

Man betrachte z.B. den Term  $\langle \phi(f)\phi(g) \rangle$  in der Störungstheorie um das freie Feld, d.h. in der (asymptotischen) Entwicklung nach  $g$ . Für das freie Feld, d.h. die Gaußsche Theorie, gilt

$$\langle \phi(f)\phi(g) \rangle_0 = \langle f, Cg \rangle .$$

Zusammen mit dem Wick-Theorem, mit dem man  $\langle \phi(f_1) \dots \phi(f_n) \rangle_0$ , auf Erwartungswerte von zwei Felder zurückführt, erhält man bis zur ersten Ordnung:

$$\begin{aligned} \langle \phi(f)\phi(g) \rangle &= \langle \phi(f)\phi(g) \rangle_0 + \frac{g}{4!} \int d^d x \langle \phi(\delta_{n,V,x})^4 \phi(f)\phi(g) \rangle_0 + \dots \\ &= \langle \phi(f)\phi(g) \rangle_0 + \frac{3g}{4!} \langle \phi(f)\phi(g) \rangle_0 \int d^d x \langle \phi(\delta_{n,V,x}) \phi(\delta_{n,V,x}) \rangle_0^2 + \dots \\ &\quad + \frac{12g}{4!} \int d^d x \langle \phi(f)\phi(\delta_{n,V,x}) \rangle_0 \langle \phi(g)\phi(\delta_{n,V,x}) \rangle_0 \langle \phi(\delta_{n,V,x})\phi(\delta_{n,V,x}) \rangle_0 \\ &\quad + \dots \\ &= \langle f, Cg \rangle + \frac{g}{8} \langle f, Cg \rangle \int d^d x \langle \delta_{n,V,x}, C\delta_{n,V,x} \rangle^2 \\ &\quad + \frac{g}{2} \int d^d x \langle f, C\delta_{n,V,x} \rangle \langle g, C\delta_{n,V,x} \rangle \langle \delta_{n,V,x}, C\delta_{n,V,x} \rangle + \dots \end{aligned}$$

Wenn  $f$  und  $g$  einen kompakten Träger haben, so kann man durch eine Translation von  $f$  und  $g$  erreichen, daß die Träger von  $f$  und  $g$  disjunkt zum Träger von  $\delta_{n,V,x}$  sind. Damit kann man den letzten Term zum Verschwinden bringen, so daß der Ausdruck auf der linken Seite in dieser Ordnung der Störungstheorie offensichtlich nicht unter euklidischen Transformationen invariant ist.

Durch ersetzen von  $f(z) = \delta(z - x_1), g(z) = \delta(z - x_2), \delta_{n,V,x}(z) = \delta(z - x)$  erhält man formal die übliche Störungsreihe zur ersten Ordnung wieder zurück.

$$\begin{aligned} \langle \phi(x_1)\phi(x_2) \rangle &= \\ &C(x_1, x_2) + \frac{g}{8} C(x_1, x_2) \int d^4 x C(x, x)^2 + \frac{g}{2} \int d^4 x C(x_1, x) C(x, x) C(x, x_2) + \dots \end{aligned}$$

Allerdings sind dann die einzelnen Terme nicht mehr endlich. Mathematisch betrachtet setzt man dabei in die Distributionen  $\phi : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$  Argumente ein, die nicht zu deren Definitionsbereich gehören.

Das  $\phi^4$ -Modell ist eine der einfachsten Quantenfeldtheorien mit (Selbst-) Wechselwirkung. Daher ist sie für das Studium der Konstruktion solcher Theorien interessant. Die euklidische Version wird auch für die Berechnung statistischer Eigenschaften von Phasenübergängen benutzt. Das 1-Komponenten-Modell ist für die Berechnung von flüssig-gasförmig-Phasenübergängen geeignet [HM94, GKM96, HM98]. Anschaulich kann man dies auch durch die Existenz der klassischen Kink-Lösungen für die Theorie in zwei Dimensionen sehen. Man sieht  $\phi$  als den Ordnungsparameter an, und der Bereich, in dem die Kink-Lösung sich schnell von einem asymptotischen Wert auf den anderen ändert, wird als die Grenzfläche zwischen den beiden Phasen interpretiert. Ferner spielt diese Theorie als Higgs-Feld eine Rolle in der spontanen Symmetriebrechung im Standardmodell.

## 2.2 Gittermodelle

Da man auf eine Regularisierung angewiesen ist, kann man auch pragmatische Gründe für die Wahl eines Verfahrens verfolgen. So ist für Simulation auf einem Rechner auch eine Regularisierung nötig, da ein Rechner nicht mit unendlich vielen Freiheitsgraden rechnen kann. Häufig benutzt wird dabei die Gitterregularisierung, bei dem die Raumzeit durch ein Gitter ersetzt wird, meist durch ein einfaches (hyper-) kubisches Gitter.

Gittermodelle sind in vielen Situationen aber auch aus physikalischen Gründen interessant. So besitzen viele Festkörper eine Kristallstruktur, die in natürlicher Weise zu einem Gittermodell führt. In der Theorie der Phasenübergänge sind Ferromagnete prominente Beispiele.

Aufgrund der Universalität kritischen Verhaltens ist man dabei nicht auf die vollständige Simulation der Einzelatome angewiesen, sondern man kann vereinfachte Modelle verwenden, die durch die Dimension, die Zahl lokaler Freiheitsgrade und deren Symmetrien ausgesucht werden können.

### 2.2.1 Ising-Modell

Eines der ältesten Modelle in der Untersuchung des Magnetismus und kritischer Phänomene ist das Ising-Modell. Es ist ein Modell, bei dem zu jedem Gitterplatz eine Variable gehört, die die Werte  $+1$  und  $-1$  annehmen kann und mit den Variablen zu den räumlich nächsten Gitterplätzen wechselwirkt.

Der Menge aller möglichen Spinkonfigurationen zu einem Gitter  $\Lambda$  ist

$$S := \{-1, +1\}^\Lambda := \{s|s : \Lambda \rightarrow \{-1, +1\}\} .$$

Ist  $|\Lambda| < \infty$ , so ist  $|\{-1, +1\}^\Lambda| = 2^{|\Lambda|}$ . Die Hamiltonfunktion des Modells lautet

$$\mathcal{H}(s, h) := -J \sum_{\vec{x}, \vec{y} \text{ n.N.}} s(\vec{x})s(\vec{y}) - \sum_{\vec{x}} h(\vec{x})s(\vec{x}) .$$

Die Vorzeichen besagen, daß es für  $J > 0$  energetisch begünstigt ist, wenn zwei Variablen den gleichen Wert haben und wenn eine Variable mit dem äußeren Feld  $h$  übereinstimmt.

Die kanonische Zustandssumme des Isingmodells auf einem kubischen Gitter mit Variablen  $s(\vec{x}) \in \{-1, +1\}$  lautet

$$Z(\beta, h) = \sum_{s \in S} e^{-\beta \mathcal{H}(s, h)} .$$

Mit dem Ising-Modell kann man kritische Größen der Universalitätsklasse ( $d, N = 1$ ) mit  $\mathbb{Z}_2$ -Symmetrie berechnen. Beispiele sind Phasenübergänge flüssig-gasförmig oder Mischungssysteme.

Verallgemeinerungen sind analoge Modelle mit Konfigurationsraum

$$S := S_N^\Lambda := \{\mathbf{s}|\mathbf{s} : \Lambda \rightarrow S_N\} ,$$

Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(\mathbf{s}, \mathbf{h}) := -J \sum_{\vec{x}, \vec{y} \text{ n.N.}} \mathbf{s}(\vec{x}) \cdot \mathbf{s}(\vec{y}) - \sum_{\vec{x}} \mathbf{h}(\vec{x}) \cdot \mathbf{s}(\vec{x}) .$$

und Zustandssumme

$$Z(\beta, \mathbf{h}) = \int \prod_{x \in \Lambda} d^N \mathbf{s}(x) e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{s}, \mathbf{h})} .$$

Diese kann man benutzen, um kritische Größen der Universalitätsklassen ( $d, N$ ) mit  $O(N)$ -Symmetrie zu berechnen. Für  $N = 3$  nennt man dieses Modell auch (klassisches) Heisenberg-Modell.

## 2.2.2 Gitter-Feldtheorie

Die Diskretisierung der  $\phi^4$ -Theorie führt zu Modellen, die die  $(d, N)$ -Universalitätsklasse mit  $O(N)$ -Symmetrie abdecken. Man startet mit der heuristischen Pfadintegralformel

$$Z(J) = \int \mathcal{D}\phi e^{-S(\phi) + (J, \phi)}$$

und ersetzt die Raumzeit durch ein kubisches Gitter.

Die Ableitungen in der Wirkung

$$S(\phi) = \int d^d x \left( \frac{1}{2} (\nabla \phi)(x)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2(x) + \frac{g}{4!} \phi^4(x) \right)$$

müssen durch Gitterableitungen ersetzt werden. Die einfachste Möglichkeit ist der Differenzenquotient

$$(\nabla^{(a)} \phi)_i(x) = \frac{1}{a} (\phi(x + ae_i) - \phi(x)) .$$

Es gibt viele andere Möglichkeiten, die Ableitung zu approximieren. Einzige Voraussetzung ist, daß man im Grenzwert  $a \rightarrow 0$  die Ableitung erhält. In der numerischen Mathematik werden Formeln bereitgestellt, für die dieser Grenzwert für „gutartige“ Funktionen besonders schnell erreicht wird.

Für den Differenzenquotient ist der erste Term in der Wirkung

$$\left( (\nabla^{(a)} \phi)_i(x) \right)^2 = \frac{1}{a^2} (\phi(x + ae_i)^2 - 2\phi(x + ae_i)\phi(x) + \phi(x)\phi(x)) .$$

Man kann die Wirkung daher folgendermaßen ausdrücken

$$\begin{aligned} S(\phi) &= \sum_x \left( \sum_{i=1}^d \frac{1}{2} (\nabla^{(a)} \phi)_i(x)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2(x) + \frac{g}{4!} \phi^4(x) \right) a^d \\ &= \sum_x \left( \frac{d}{a^2} a^d \phi^2(x) - \sum_{i=1}^d \frac{1}{a^2} a^d \phi(x + ae_i) \phi(x) + \frac{1}{2} m^2 a^d \phi^2(x) + \frac{ga^d}{4!} \phi^4(x) \right) \\ &= \sum_x \left( \frac{\mu^2 a^d}{2} \phi^2(x) - \beta \sum_{i=1}^d \phi(x + ae_i) \phi(x) + \frac{ga^d}{4!} \phi^4(x) \right) , \end{aligned}$$

mit  $\mu^2 = m^2 + \frac{2d}{a^2}$ ,  $\beta = a^{d-2}$ .

Schließlich bringt man diese Wirkung noch in eine dimensionslose Form, die auch den Zusammenhang mit der statistischen Gitterphysik besonders deutlich macht. Neben neuen, dimensionslosen Feldern führt man dabei eine dimensionslose Koppelungskonstante  $\kappa$  für den zweiten Term der Wirkung ein, der Felder an verschiedenen Gitterpunkten koppelt. Aus

$$\sum_x a^{d-2} \phi(x) \phi(x + ae_i) \stackrel{!}{=} 2\kappa \sum_x \varphi(x) \varphi(x + ae_i)$$

erhält man

$$\phi(x) = \sqrt{2\kappa a^{\frac{2-d}{2}}} \varphi(x)$$

und

$$S(\varphi) = \sum_x (m^2 + \frac{2d}{a^2}) \kappa a^2 \varphi^2(x) - 2\kappa \sum_{x,i} \varphi(x) \varphi(x + ae_i) + \sum_x \frac{g(2\kappa)^2}{4!a^{d-4}} \varphi(x)^4.$$

Die dimensionslose  $\varphi^4$ -Kopplung wird dadurch definiert, daß man den  $\varphi^2$ - und den  $\varphi^4$ -Term in die Gestalt

$$\lambda(\varphi^2(x) - 1)^2 + \varphi^2(x)$$

bringt. Durch Koeffizientenvergleich liest man

$$1 - 2\lambda = (m^2 + \frac{2d}{a^2}) \kappa a^2 \Rightarrow a^2 m^2 = \frac{1 - 2\lambda}{\kappa} - 2d$$

und

$$\lambda = \frac{g}{4!} \frac{4\kappa^2}{a^{d-4}} \Rightarrow g = \frac{6\lambda a^{d-4}}{\kappa^2}$$

ab. Die Wirkung lautet nun

$$S(\varphi) = \sum_x \left( -2\kappa \sum_i \varphi(x) \varphi(x + ae_i) + \varphi^2(x) + \lambda(\varphi^2(x) - 1)^2 + \lambda \right). \quad (2.4)$$

Den konstanten Term kann man jedoch fortlassen, da er sich bei der Berechnung der Erwartungswerte herauskürzt.

Die Wirkung besteht aus einem ultralokalen Teil  $S^\circ : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  und einem Teil, der Felder an verschiedenen Gitterpunkten koppelt

$$S(\varphi) = \sum_x S^\circ(\varphi(x)) - \frac{1}{2} \sum_{x,y:x \neq y} \varphi(x) v(x,y) \varphi(y)$$

mit

$$v(x,y) = \begin{cases} 2\kappa & , x, y \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}.$$

Für Modelle mit  $N$  Komponenten-Feldern  $\varphi$  hat man entsprechend

$$v_{a,b}(x,y) = \begin{cases} 2\kappa \delta_{a,b} & , x, y \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases},$$

und der Kopplungsteil der Wirkung lautet

$$-\frac{1}{2} \sum_{x,y:x \neq y} \sum_{a,b=0}^N \varphi_a(x) v_{a,b}(x,y) \varphi_b(y).$$

Welche Bedeutung haben die Parameter und Terme dieser Wirkung? Für große  $\lambda$  wird das Feld immer mehr auf den Bereich mit  $\varphi^2 = 1$  eingeschränkt. Dies entspricht der Forderung an  $O(N)$ -symmetrische  $\sigma$ -Modelle. Im Hinblick auf die statistische Physik in Abschnitt 2.2.1 erhält man für  $N = 1$  das Ising-Modell und für  $N = 3$  das Heisenberg-Modell.

Im Fall kleiner  $v$  bzw.  $\kappa$  ist die Kopplung zwischen den Gitterpunkten klein. Im Grenzwert  $v \rightarrow 0$  faktorisiert die erzeugende Funktion

$$Z(J) = \int \prod_x d\varphi(x) e^{-\sum S^\circ(\varphi(x)) + (J, \varphi)} = \prod_x \int d\varphi(x) e^{-S^\circ(\varphi(x)) - J(x) \cdot \phi(x)}.$$

Der ultralokale Teil der Wirkung gehört zu einer „nulldimensionalen“ Feldtheorie. Diese Theorie ist in dem Sinne lösbar, daß man die eindimensionalen Integrale ggf. numerisch berechnen kann.

## 2.3 Interessierende Größen

Die wichtigen Objekte einer statistischen Theorie sind die Momente, also die Korrelationsfunktionen, die sich aus der erzeugenden Funktion gewinnen lassen. In der Quantenfeldtheorie erlauben sie die Berechnung von Streuprozessen. Auch in der Statistik spielen sie bei Streuprozessen eine wichtige – wenn auch etwas andere – Rolle. Bei der Streuung von Neutronen an ferromagnetischen Substanzen tritt die räumliche Fouriertransformierte der Zweipunktfunktion auf [BDFN98, Anhang A].

Die zentrale Eigenschaft der Korrelationsfunktionen ist, daß man andere statistische Erwartungswerte aus ihnen berechnen kann. Man unterscheidet drei Klassen solcher Funktionen

1. Die Korrelationsfunktionen oder Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung
2. Die Kumulanten oder *trunkierten* Korrelationsfunktionen. [Rue69, MM94]
3. Die Vertexfunktionen

In der Störungstheorie erhält man durch die Entwicklung nach der Kopplung für die Korrelationsfunktionen eine asymptotische Reihe nicht notwendigerweise zusammenhängender Feynman-Graphen, für die Kumulanten eine asymptotische Reihe zusammenhängender Graphen und für die Vertexfunktionen eine asymptotische Reihe ein-Teilchen-irreduzibler Graphen (1PI-Graphen). Man nennt daher die Kumulanten auch zusammenhängende Korrelationsfunktionen und die Vertexfunktionen auch 1PI-Funktionen.

Die erzeugende Funktion der Korrelationsfunktionen ist  $Z$ , die der Kumulant  $W := \log Z$ .  $W$  ist in der statistischen Physik proportional zur freien Energie. Die Quelle  $J$  hat dann die Bedeutung eines äußeren Feldes. Die erzeugende Funktion  $\Gamma$  der Vertexfunktionen ist die Legendre-Transformierte von  $W$  nach der Quelle  $J$ . In der statistischen Physik erhält man so die freie Enthalpie, die in der englischen Literatur auch Gibbsche freie Energie genannt wird.  $\Gamma$  ist eine Funktion des (lokalen) Erwartungswertes  $\bar{\phi}$  des Feldes mit

$$\bar{\phi}_a(x) = \frac{\partial W}{\partial J_a(x)} = \langle \phi_a(x) \rangle_{c,J} = \langle \phi_a(x) \rangle_J .$$

### 2.3.1 Physikalische Kopplungen

Bei der Untersuchung kritischer Phänomene sind auch aus den Korrelationsfunktionen abgeleitete Größen wichtig, die für die physikalische Theorie charakteristisch sind. Anhand der Korrelationslänge bzw. der physikalischen Masse kann man feststellen, ob ein Phasenübergang zweiter Ordnung vorliegt.

Diese Untersuchung ist auch deswegen wichtig, weil für die eingangs besprochenen Grenzwerte zur Entfernung der Regularisierung, die Theorie an ihren kritischen Punkt gebracht werden muß.

Charakteristisch für eine Theorie sind physikalisch meßbare Größen wie Massen. Die Theorie macht Voraussagen in Form von Erwartungswerten. Die physikalischen Kopplungen sind daher durch das Verhalten von Korrelationsfunktionen zu definieren; es sind in diesem Sinne also *effektive* Größen.

Betrachten wir zunächst ein 1-Komponenten-Modell als Kontinuumstheorie. Die Masse gehört zum asymptotischen Verhalten der Zweipunktfunktion für große Abstände der beiden Argumente. Dies sieht man am besten durch Fouriertransformation. Für massive freie Theorien mit der Masse  $m$  ist der Propagator

$$G_2^{(0)}(x, y) := \langle \phi(x) \phi(y) \rangle_0 = C(x - y)$$

mit dem Kern des Kovarianzoperators  $C$ . Mit dem üblichen Bezeichnungsmißbrauch ist  $C = (-\Delta + m^2)^{-1}$ . Die Fouriertransformierte  $\tilde{C}$  von  $C$  ist

$$\tilde{C}(p) = \frac{1}{p^2 + m^2} = \tilde{G}_2^{(0)}(p) = \tilde{G}_2^{c(0)}(p) .$$

Die Fourier-Rücktransformation ergibt

$$C(x, y) = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{1}{p^2 + m^2} e^{ip \cdot (x-y)} = m^{d-2} \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{1}{p^2 + 1} e^{ip \cdot (m(x-y))}$$

Dieses Integral ist exakt berechenbar [GJ87, 7.2.2], und man erhält

$$C(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left( \frac{m}{|x - y|} \right)^{\frac{d-2}{2}} K_{\frac{d-2}{2}}(m|x - y|).$$

Dabei ist  $K_\nu$  die modifizierte Besselfunktion zu  $H_\nu$  [AS84].

Das asymptotische Verhalten dieser Funktion ist für kleine Argumente

$$C(x, y) \sim \frac{1}{4\pi^{-d/2}} \Gamma\left(\frac{d-2}{2}\right) \frac{1}{|x - y|^{d-2}}$$

und für große Argumente

$$C(x, y) \sim \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} m^{\frac{d-3}{2}} \frac{1}{|x - y|^{\frac{d-1}{2}}} e^{-m|x - y|}.$$

Der Propagator einer massiven, freien Theorie fällt für große Argumente exponentiell ab. Ferner hat der Propagator im Fourierraum eine viel einfachere Form als im Ortsraum. Für eine Theorie mit Wechselwirkung und Cutoff benutzt man diese Beobachtungen, um physikalische Kopplungen zu definieren. Bei einer massiven Theorie mit Wechselwirkung und Cutoff erwartet man asymptotisch für kleine Impulse  $p$  bzw. große Abstände wieder ein solches Verhalten der Korrelationsfunktion:

$$\tilde{G}_2^c(p) \sim \frac{Z_r}{m_r^2 + p^2} + \mathcal{O}(p^4),$$

mit zwei Konstanten  $Z_r$  und  $m_r$ , die Wellenfunktions-Renormierungskonstante und renormierte Masse genannt werden. Dies gehört zu einem exponentiellen Abfall der räumlichen Korrelationsfunktionen  $\propto e^{-m_r^2 \|x\|}$ .

Wegen des Zusammenhangs

$$\tilde{\Gamma}_2(p) = -\frac{1}{\tilde{G}_c^{(2)}(p)}$$

hat man

$$\tilde{\Gamma}_2(p) = -\frac{1}{Z_r} (m_r^2 + p^2 + \mathcal{O}(p^4)) \text{ für } p = (p_0 = 0, \vec{p} \rightarrow 0).$$

Weitere effektive Kopplungen werden über die Fouriertransformierten der Vertexfunktionen definiert

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_4(0, 0, 0, 0) &= -\frac{g_r}{Z_r^2} \text{ und} \\ \tilde{\Gamma}_6(0, 0, 0, 0, 0, 0) &= -\frac{h_r}{Z_r^3} \end{aligned}$$

und entsprechend für höhere Vertexfunktionen. Eine Motivation vom Standpunkt der Quantenfeldtheorie ist, daß man in der Störungstheorie in der ersten Ordnung für diese Größen die nackten Kopplungen aus der Lagrangedichte zurück erhält. Vom Standpunkt der statistischen Physik ist der Zusammenhang mit den Suszeptibilitäten, d.h. meßbaren, makroskopischen Größen, wichtig. Dieser Zusammenhang wird weiter unten diskutiert.

### **$O(N)$ -invariante $N$ -Komponenten-Modelle**

Im Fall von  $O(N)$ -invarianten  $N$ -Komponenten-Modellen gibt es für die Phase gebrochener Symmetrie Komplikationen bei der oben verwendeten Definition, weil Goldstone-Moden auftreten. Für diese Arbeit sind aber nur Definitionen für die Phase mit nicht gebrochener Symmetrie erforderlich. In diesem Fall sind die Definitionen relativ einfach zu übertragen.

Die physikalischen Kopplungen lauten nun

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{2,ab}(p) &= -\frac{1}{Z_r} (m_r^2 + p^2 + \mathcal{O}(p^4)) \delta_{ab} \text{ für } p = (p_0 = 0, \vec{p} \rightarrow 0) \\ \tilde{\Gamma}_{4,abcd}(0, 0, 0, 0) &= -\frac{g_r}{Z_r^2} \frac{C_4(a, b, c, d)}{3} \text{ und} \\ \tilde{\Gamma}_{6,abcdef}(0, 0, 0, 0, 0, 0) &= -\frac{h_r}{Z_r^3} \frac{C_6(a, b, c, d, e, f)}{15}\end{aligned}$$

mit den  $O(N)$ -invarianten Tensoren  $C_{2n}$  (vgl. dazu 3.3.1).

### **2.3.2 Suszeptibilitäten**

Die Suszeptibilitäten oder Antwortfunktionen spielen einerseits als physikalisch meßbare Größen bei Experimenten eine wichtige Rolle. Andererseits sind sie bei numerischen Berechnungen im Rahmen von Monte-Carlo-Simulationen oder Reihenentwicklungen relativ leicht zugängliche Größen. Zunächst wird wieder der Fall einer Komponente betrachtet. Ferner wird Translationsinvarianz des Systems angenommen, so daß die Suszeptibilität unabhängig vom Ort ist. In diesem Fall gilt

$$\chi_2 := \sum_x \langle \phi(x) \phi(0) \rangle_c = \sum_x G_2^c(x, 0) e^{-ipx} |_{p=0} = \tilde{G}_2^c(0) = -\frac{1}{\tilde{\Gamma}_2(0)} = \frac{Z_r}{m_r^2}. \quad (2.5)$$

Zur Bestimmung der Wellenfunktions-Renormierungskonstante  $Z_r$  durch Suszeptibilitäten benötigt man noch die Ableitung der Zweipunktfunktion

$$\frac{\partial^2}{\partial p^\nu \partial p^\nu} \tilde{G}_2^c(p) |_{p=0} = -\frac{2dZ_r}{m_r^4}. \quad (2.6)$$

Setzt man dies in die Definition der Fouriertransformierten von  $G_2^c$  auf dem Gitter ein, so erhält man die gewichtete Suszeptibilität  $\mu_2$  durch

$$\mu_2 := \sum_x x^2 G_2^c(x, 0) = -\frac{\partial^2}{\partial p^\nu \partial p^\nu} \sum_x G_2^c(x, 0) e^{-ipx}|_{p=0}, \quad (2.7)$$

d.h. es gilt

$$\mu_2 = \frac{2dZ_r}{m_r^4}. \quad (2.8)$$

Ganz analog erhält man per Fouriertransformation

$$\chi_4 := \sum_{x_1, x_2, x_3} \langle \phi(x_1) \phi(x_2) \phi(x_3) \phi(0) \rangle_c = \tilde{G}_4^c(0, 0, 0, 0) \quad (2.9)$$

sowie

$$\chi_6 := \sum_{x_1, \dots, x_5} \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_5) \phi(0) \rangle_c = \tilde{G}_6^c(0, \dots, 0). \quad (2.10)$$

Für die Zweipunktfunktionen konnte man den Zusammenhang der Vertexfunktionen mit den Suszeptibilitäten dadurch herleiten, daß der Zusammenhang mit den Vertexfunktionen bekannt war. Dies ist auch die Information, die man für die renormierte  $\phi^4$ -Kopplung  $g_r$  benötigt: Wie läßt sich die Fouriertransformierte der 4-Punkt-Vertexfunktion durch zusammenhängende Funktionen ausdrücken? Es gilt bei verschwindendem Impuls für die symmetrische Theorie (Hochtemperatur-Phase) [MM94, S. 58]

$$\tilde{\Gamma}_4(0, \dots, 0) = \frac{\tilde{G}_4^c(0, \dots, 0)}{\tilde{G}_2^c(0)^4} = \frac{\chi_4}{\chi_2^4}$$

Für  $\chi_4$  bekommt man dann

$$\chi_4 = -\frac{g_r}{Z_r^2} \frac{m_r^8}{Z_r^4} = -\frac{g_r Z_r^2}{m_r^8}$$

Damit kennt man nun die Suszeptibilitäten als Funktion der renormierten Kopplungen. Umgekehrt gilt für die renormierten Kopplungen

$$m_r^2 = \frac{2d}{\mu_2} \chi_2, \quad Z_r = \frac{2d}{\mu_2} \chi_2^2, \quad g_r = -\left(\frac{2d}{\mu_2}\right)^2 \chi_4,$$

### **$O(N)$ -invariante $N$ -Komponenten-Modelle**

Für den Fall  $O(N)$ -invarianter  $N$ -Komponentenmodelle in der Phase ungebrochener Symmetrie sind die Formeln für die Suszeptibilitäten genau analog definiert. Es gilt

$$\sum_x \langle \phi_a(x) \phi_b(0) \rangle_c = \delta_{ab} \sum_x \langle \phi_1(x) \phi_1(0) \rangle_c = \delta_{ab} \tilde{G}_2^c(0). \quad (2.11)$$

Aufgrund der  $O(N)$ -Invarianz kann man hier die Abkürzung  $G_2^c = G_{2,1,1}^c = G_{2,a,a}^c = G_{2,b,b}^c$  benutzen. Man definiert dann

$$\chi_2 \delta_{ab} = \sum_x \langle \phi_a(x) \phi_b(0) \rangle_c = \delta_{ab} \tilde{G}_2^c(0) = -\frac{\delta_{ab}}{\tilde{\Gamma}_2(0)} = \frac{Z_r}{m_r^2} \delta_{ab}. \quad (2.12)$$

Man kann daher auch ohne Einschränkung alle Komponenten von  $\phi$  gleich wählen

$$\chi_2 = \sum_x \langle \phi_1(x) \phi_1(0) \rangle_c = \tilde{G}_2^c(0) = -\frac{\delta_{ab}}{\tilde{\Gamma}_2(0)} = \frac{Z_r}{m_r^2}. \quad (2.13)$$

Entsprechend gilt

$$\chi_4 \frac{C_4(a, b, c, d)}{3} := \sum_{x_1, x_2, x_3} \langle \phi_a(x_1) \phi_b(x_2) \phi_c(x_3) \phi_d(0) \rangle_c \quad (2.14)$$

und

$$\chi_6 \frac{C_6(a, b, c, d, e, f)}{15} := \sum_{x_1, \dots, x_5} \langle \phi_a(x_1) \dots \phi_e(x_5) \phi_f(0) \rangle_c. \quad (2.15)$$

Mit diesen Definitionen kann man die Formeln für den Zusammenhang der physikalischen Kopplungen mit den Suszeptibilitäten vom Modell mit einer Komponente übernehmen.

### **2.3.3 Kritische Phänomene**

Am kritischen Punkt verschwindet die renormierte Masse und die Korrelationslänge  $\xi = \frac{1}{m_r}$  wird unendlich. Die Korrelationsfunktionen fallen nicht mehr exponentiell mit dem Abstand ab, sondern mit einer Potenz des Abstandes. Es gibt langreichweite Korrelationen. Diese machen sich in Streuexperimenten durch kritische Opaleszenz bemerkbar.

Die Suszeptibilitäten enthalten die renormierte Masse im Nenner. Die Suszeptibilitäten sind daher dort ebenfalls potentiell singulär.

Mikroskopisch verschiedene Systeme verhalten sich am kritischen Punkt gleichartig. Ihre Divergenzen werden durch kritische Exponenten beschrieben, die innerhalb der Universalitätsklassen gleich sind. Für magnetische Systeme hat man

Wärmekapazität	$C_H$	$\sim$	$ t ^{-\alpha}$	für $H = 0$
Magnetisierung	$m$	$\sim$	$(-t)^\beta$	für $t < 0$
isotherme Suszeptibilität	$\chi_T$	$\sim$	$ t ^{-\gamma}$	für $H = 0$
äußeres Feld	$ H $	$\sim$	$ m ^\delta$	für $t = 0$
Korrelationslänge	$\xi$	$\sim$	$ t ^{-\nu}$	für $H = 0$
Korrelationsfunktion	$G_c^2(\vec{r})$	$\sim$	$ \vec{r} ^{-(d-2+\eta)}$	für $t = 0, H = 0$ .

Dabei ist  $t$  die reduzierte Temperatur  $\frac{|T-T_c|}{T_c}$ , und  $f(t) \sim t^\lambda$  bedeutet, daß der Grenzwert  $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\log f(t)}{\log t}$  existiert und gleich  $\lambda$  ist.

## 2.4 Physikalische Systeme

Die Theorie der Renormierungsgruppe sagt voraus, daß sich verschiedene physikalische Systeme sich am kritischen Punkt gleichartig verhalten. Uns interessieren in dieser Arbeit besonders die Universalitätsklassen ( $d = 3, N = 1$ ) mit  $\mathbb{Z}_2$ -Symmetrie und ( $d = 3, N = 2$ ) mit  $O(2)$ -Symmetrie. Man nimmt an, daß zur ersten Klasse physikalische Systeme mit einem eindimensionalen Ordnungsparameter wie flüssig-gasförmige Systeme und Mischungssysteme mit zwei Komponenten gehören und zur zweiten Klasse der  $\lambda$ -Übergang von  ${}^4He$ . Der  $\lambda$ -Übergang von Helium wird schon lange untersucht [Fey53a, Fey53b, Fey98] und ist in letzter Zeit wieder in das Blickfeld experimenteller Untersuchungen gerückt, weil die Bestimmung kritischer Exponenten bei ihm besonders genau möglich ist.

Ein Ziel theoretischer Untersuchungen kritischer Phänomene ist, die Hypothese der Universalität kritischen Verhaltens zu testen. Geeignete Testgrößen sind u.a. die kritischen Exponenten. Insbesondere die kritischen Exponenten des  $\lambda$ -Überganges des Helium kann man sehr genau vermessen. Zuletzt gab es eine weitere Verbesserung der Genauigkeit durch ein Experiment an Bord des Space Shuttle, bei dem man die störenden Einflüsse der Gravitation auf der Erdoberfläche umgehen konnte [LSN<sup>96</sup>].

# KAPITEL 3

---

## Die Cluster-Entwicklung

---

Der Begriff „Cluster-Entwicklung“ wird für verschiedene Entwicklungen sowohl für Gittertheorien als auch für Kontinuums-Theorien verwendet. Eine Einführung in den allgemeinen Fall von Clusterentwicklungen findet man im Buch von Glimm und Jaffe [GJ87, Kapitel 18]. Im Rahmen von „Polymer-Entwicklungen“ faßt man die Theorie vieler Entwicklungen zusammen [GJ87, Kapitel 20]. Man erreicht mit ihnen die Trennung der Theorie in die wichtigen Bestandteile:

1. Definition der Graphen (Polymere)
2. Kombinatorik (Berechnung der Mächtigkeit der Äquivalenzklassen von Graphen)
3. Analyse der Beiträge von Graphen und der Abschätzungen, die für die Untersuchung der Konvergenz bzw. Divergenz nötig sind.

Daher fallen sowohl asymptotische Entwicklungen in den Bereich der Polymer-Entwicklungen und man kann auch formale Resummationen durchführen, die für den Fall absolut konvergenter Reihen dann exakt sind. Beispiele solcher Entwicklungen findet man in [Mün81], [Por90], [Por85] und [Sal99].

In diesem Kapitel wird die Linked Cluster Entwicklung für die im ersten Kapitel vorgestellt  $\phi^4$ -Theorie auf dem Gitter als Grundlage benutzt. Solche Entwicklungen werden schon lange benutzt. Ein zusammenfassender Artikel ist [Wor74]. Mit Hilfe

dieser Entwicklung wurden sowohl Modelle mit  $N = 1$  [LW87, LW88b], als auch mit mehr als einer Komponente [LW89] behandelt. Schließlich wurde die Reihe bis zur 20. Ordnung automatisiert berechnet [Rei95a],[Rei98a, Abschnitt 4.1] und mit Hilfe dieser Reihen kritische Daten berechnet [Rei95b].

In dieser Arbeit wurde auf die Programme zur automatisierten Berechnung der Linked Cluster Entwicklung von Reisz zurückgegriffen.

### 3.1 Die Situation

Gegeben sei ein Gitter. Üblicherweise betrachtet man zunächst Gitter (-tori)

$$\Lambda(L) = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$$

und führt dann den Grenzwert  $L \rightarrow \infty$  aus. Dies entspricht dann Theorien auf

$$\Lambda = \mathbb{Z}^d .$$

Im folgenden sei mit  $\Lambda$  eines dieser Gitter bezeichnet.

Zu dem Gitter hat man Funktionenräume  $(\mathbb{R}^N)^\Lambda = \{f|f : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}^N\}$ . Für die Konstruktion von Gittertheorien ist die Teilmenge  $\mathcal{H}(\Lambda) \subseteq (\mathbb{R}^N)^\Lambda$  der Funktionen wichtig, deren Norm  $\|\cdot\| := \sqrt{(\cdot, \cdot)}$  endlich ist. Die Norm ist durch das Skalarprodukt

$$(\psi, \phi) := \sum_{x \in \Lambda} \psi(x) \cdot \phi(x) = \sum_{x \in \Lambda} \sum_{a=1}^N \psi_a(x) \phi_a(x)$$

definiert.

Ein Modell auf diesem Gitter ist durch eine Partitionsfunktion

$$Z : \mathcal{H}(\Lambda) \times I \rightarrow \mathbb{R}$$

gegeben.  $I$  ist dabei eine Menge von Kopplungen. Die Abhängigkeit von den Kopplungen wird bei der Notation aber meist unterdrückt. Konkret hat eine solche Partitionsfunktion die Form

$$Z(J) := \int \prod_{x \in \Lambda} d^N \phi(x) \exp(-S(\phi) - (J, \phi))$$

mit

$$S(\phi) = \sum_{x \in \Lambda} S^\circ(\phi(x)) + \frac{1}{2} \sum_{x,y:x \neq y} \sum_{a,b=1}^N \phi_a(x) v_{a,b}(x, y) \phi_b(y) .$$

$S^\circ : \mathbb{R}^N \times J \rightarrow \mathbb{R}$  ist der ultralokale Teil der Wirkung und ist von einem Teil der Kopplungen abhängig,  $v_{a,b}(x, y)$  modelliert die Kopplungen zwischen verschiedenen Gitterpunkten. Für den Fall

$$v_{a,b}(x, y) = \begin{cases} 2\kappa\delta_{a,b} & , x, y \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases},$$

hat  $\kappa$  in der statistischen Mechanik die Bedeutung einer inversen Temperatur, in der Feldtheorie auf dem Gitter ist es der „hopping parameter“, der die Kopplung der Felder verschiedener Gitterpunkte beschreibt.

Wie in Kapitel 2 gezeigt, treten Modelle dieser Art im Rahmen der statistischen Physik und im Rahmen der Gitterfeldtheorie auf. Die Methoden, die im folgenden beschrieben werden, sind also in beiden Fällen anwendbar.

## 3.2 Entwicklungen

Die Partitionsfunktion bzw. die Korrelationsfunktionen sind zu berechnen. Wenn man eine geschlossene Lösung nicht finden kann, sucht man nach Möglichkeiten, die Ergebnisse auf andere Weise zu erhalten. Eine von vielen Herangehensweisen sind Reihenentwicklungen. Man sucht dabei nach einer Reihe, die das gesuchte Ergebnis approximiert und deren einzelne Terme berechenbar sind.

Weit verbreitet sind asymptotische Entwicklungen, wie die Störungstheorie. Man benutzt freie Felder als Ausgangspunkt, weil deren Erwartungswerte über das Wick-Theorem exakt berechenbar sind. In diesem Fall sind die resultierenden Reihen typischerweise nicht konvergent [Jaf65]. Dennoch geben sie für kleine Kopplungen gute Approximationen und es gibt Resummationsmethoden, mit denen man das Ergebnis auch auf endliche Kopplungen anwenden kann [Riv91].

Eine weitere Möglichkeit ist die Entwicklung um den entkoppelten Fall  $\kappa = 0$ , die sogenannte „Hopping-Parameter-Entwicklung“ (HPE, auch für „hopping parameter expansion“). Hier benutzt man die Tatsache, daß eine nulldimensionale (ultralokale) Quantenfeldtheorie zumindest in dem Sinne lösbar ist, daß man die auftretenden endlichdimensionalen Integrale der Form

$$\int d\phi(x) e^{-S^\circ(\phi)}$$

gegebenenfalls numerisch lösen kann. Häufig ist dies sogar exakt möglich. Da bei diesem Verfahren die konvergenzerzeugenden Terme der Wirkung im Integral verbleiben, konvergiert dieses Verfahren sogar für intensive Größen im unendlichen Volumen [Por96].

In der statistischen Physik hat  $\kappa$  die Bedeutung einer inversen Temperatur, die Entwicklung um  $\kappa = 0$  ist dann die „Hochtemperatur-Entwicklung“ (HTE, auch für „high temperature expansion“). In der Theorie der realen Gase entspricht dies der Mayer-Entwicklung. Die Linked Cluster Entwicklung ist eine Verallgemeinerung dieser Entwicklungen, bei denen man auch andere als Kopplungen nächster Nachbar zulässt.

Diese Verfahren ergänzen sich gegenseitig. Für die  $\phi^4$ -Theorie in 4 Dimensionen mit einer Komponente (Ising-Universalitätsklasse) hat man so das Modell in einem großen Bereich des Parameterraumes berechnen können, indem man die Hochtemperatur-Entwicklung in der Hochtemperaturphase bis in die Nähe des kritischen Punktes benutzt hat und dort bei kleiner Kopplung die störungstheoretische Betafunktion verwendet hat [LW87, LW88b].

Dieses Verfahren kann für die dreidimensionale Theorie nicht benutzt werden, da die Theorie in der Nähe des kritischen Punktes keine kleine Kopplung hat und es einen nichttrivialen Fixpunkt der Renormierungsgruppentransformation gibt.

Für den Fall  $N = 1, \lambda \rightarrow \infty$  wird das betrachtete Modell zum Ising-Modell. Für dieses existiert noch eine Tief temperatur-Entwicklung um den vollständig gekoppelten Fall [VW92].

### 3.3 Linked Cluster Entwicklung

Die Linked Cluster Entwicklung ist eine Verallgemeinerung der Hopping Parameter Entwicklung. Sie ist die Taylor-Entwicklung der erzeugenden Funktion um  $v = 0$ , wenn man  $v$  als Vektor von Variablen interpretiert [Wor74, LW88a].

Betrachten wir zunächst ein endliches Gitter  $\Lambda(L) = (\mathbb{Z}/(L\mathbb{Z}))^d$ . Ein Feld auf dem Gitter entspricht dann den  $NL^d$  Variablen

$$\{\phi_a(x) | a \in \{1, \dots, N\}, x \in \Lambda\}$$

Eine Kopplung  $v$  entspricht ganz analog den  $(NL^d)^2$  Variablen

$$\{v_{a,b}(x, y) | a, b \in \{1, \dots, N\}, x, y \in \Lambda\} .$$

Seien diese Variablen irgendwie durchnummerniert, so daß

$$\{\hat{v}_i | i \in \{1, \dots, (NL^d)^2\}\} = \{v_{a,b}(x, y) | a, b \in \{1, \dots, N\}, x, y \in \Lambda\} ,$$

und seien ferner  $\mathbf{n} := (NL^d)^2$ ,  $m \in \mathbb{N}^{\mathbf{n}}$  und wie üblich

$$|m| := \prod_{i=1}^{\mathbf{n}} m_i , \quad m! := \prod_{i=1}^{\mathbf{n}} m_i! , \quad v^m := \prod_{i=1}^{\mathbf{n}} v_i^{m_i} \text{ und } D^m := \frac{\partial^{|m|}}{\partial v_1^{m_1} \dots \partial v_{\mathbf{n}}^{m_{\mathbf{n}}}} .$$

Dann lautet die Taylorentwicklung um  $\hat{v} = 0$

$$W(J, v) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m:|m|=n} \frac{D^m W(J, \cdot)}{m!}(0) v^m = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m:|m|=n} w_m(S, J) v^m .$$

Formal ist dies

$$\begin{aligned} W(J, v) &= \left( \exp(v \cdot \nabla) W \right)(J, 0) \\ &= \left( \exp \left( \sum_{a,b,x,y} v_{a,b}(x, y) \frac{\partial}{\partial v_{a,b}(x, y)} \right) W \right)(J, 0) . \end{aligned}$$

Die Koeffizienten der Entwicklung,

$$w_m(J) = \frac{\partial^{|m|} W}{\partial v_1^{m_1} \dots \partial v_n^{m_n}}(J, 0) , \quad (3.1)$$

sind also mehrfache Ableitungen nach der Wechselwirkung von der Form

$$w_m(J) = \frac{\partial^{|m|} W}{\partial v_{a_1,b_1}(x_1, y_1)^{m_1} \dots \partial v_{a_k,b_k}(x_k, y_k)^{m_k}}(J, 0) \quad (3.2)$$

Diese Überlegungen geben den Anschluß an die mathematische Theorie der Taylorreihen und es ist nun möglich, die Konvergenz solcher Entwicklungen zu untersuchen. Die Entwicklung ist konvergent unter der Bedingung, daß die Wechselwirkung  $v$  genügend klein und lokal ist. Die erste Bedingung würde man dabei schon aus allgemeinen Überlegungen aus der Theorie der Taylorreihen erwarten. Die Frage ist dabei, ob der Konvergenzbereich der Reihe den physikalisch interessierenden Bereich erfaßt. Die zweite Bedingung „lokal“ bezieht sich auf die spezielle Form der Entwicklung. Mit dem Abstand zweier Punkte auf dem Gitter soll die Kopplung der Felder an diesen Punkten schnell genug klein werden.

Man zeigt die Konvergenz im endlichen Volumen - in dem es allerdings auch keine Divergenzen bzw. Phasenübergänge gibt - durch den Satz von der majorisierten Konvergenz [Rei95a]. Im unendlichen Volumen wurde die Konvergenz für die (intensiven) zusammenhängenden Greenschen Funktionen und Suszeptibilitäten mit Hilfe der Theorie der Polymerentwicklungen gezeigt [Por96]. Die Grenze der Konvergenz im unendlichen Volumen für Modelle mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung, die durch den Hopping-Parameter  $\kappa$  beschrieben wird, ist die kritische Kopplung  $\kappa_c$  (Abb. 3.1).

Bezieht man sich auf den Fall der Wechselwirkungen vom nächste-Nachbar-Typ, so ist die Bedingung der Lokalität erfüllt. Wechselwirkungen, die nicht von diesem Typ sind sowie die Konvergenz der LCE in diesem Fall wurden von A. PORDT und T. REISZ [PR97a] untersucht. In dieser Arbeit wird es um nächste-Nachbar-Wechselwirkungen gehen, die Theorie wird aber, so weit es keine unnötige Komplikation darstellt, für allgemeine Wechselwirkungen entwickelt.

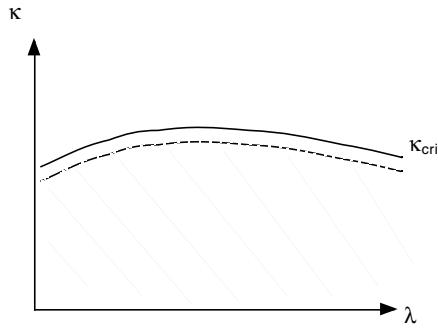


Abb. 3.1: Konvergenzbereich der LCE

### 3.3.1 Die ultralokale Theorie

Die Koeffizienten  $w_m$  der LCE sind die zusammenhängenden Korrelationsfunktionen der ultralokalen Theorie mit der Wirkung

$$S(\phi, 0) = \sum_x S^\circ(\phi(x)) .$$

In diesem Fall faktorisiert die Zustandssumme

$$Z(J, 0) = \prod_x \int d\phi(x) e^{-S^\circ(\phi(x)) - J(x) \cdot \phi(x)} = \prod_x Z^\circ(J(x))$$

in ein Produkt von Zustandssummen  $Z^\circ$  einer nulldimensionalen Theorie. Die erzeugende Funktion der Kumulanten ist eine Summe von Termen, die nur von einem Punkt abhängen

$$W(J, 0) = \log Z(J, 0) = \sum_x \log Z^\circ(J(x)) = \sum_x W^\circ(J(x)) .$$

#### Die Erwartungswerte und Kumulanten der ultralokalen Theorie

Da  $W(J, 0)$  eine Summe von Termen ist, die jeweils nur vom  $J(x)$  abhängen, verschwinden mehrfache Ableitungen nach der Quelle an verschiedenen Orten. Dies gilt also auch für die zusammenhängenden Korrelationsfunktionen von Feldern verschiedener Orte. Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial J_{a_i}(x_i)} \sum_x W^\circ(J(x)) = \frac{\partial}{\partial J_{a_i}(x_i)} W(J(x_i)) .$$

Folglich müssen alle Ableitungen nach der Quelle am gleichen Ort vorgenommen werden, damit das Ergebnis nicht Null ist. In diesem Abschnitt hängen die „Korrelationsfunktionen“ also nur von einem Punkt ab. Sie werden daher als Erwartungswerte bezeichnet. Es gilt also

$$\langle \phi_{a_1}(x_1) \dots \phi_{a_{2n}}(x_{2n}) \rangle_{c,J}^0 = \begin{cases} \langle \phi_{a_1}(x_1) \dots \phi_{a_{2n}}(x_1) \rangle_{c,J}^0 & : x_1 = x_2 = \dots = x_{2n} \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

### Die $O(N)$ -symmetrische Theorie

Das Maß der nulldimensionalen Theorie ohne äußere Quelle ist  $O(N)$ - bzw.  $\mathbb{Z}_2$ -invariant, wenn dies für  $S^\circ$  zutrifft. Für solche Maße sind alle Erwartungswerte und Kumulanten Null, bei denen eine Komponente des Feldes mit einer ungeraden Potenz vorkommt, weil dann bei der Berechnung die Integration einer ungeraden Funktion über symmetrische Grenzen auftritt. Insbesondere verschwinden alle Erwartungswerte mit einer ungeraden Anzahl von Feldern. Man kann die weitere Untersuchung daher auf Erwartungswerte einer geraden Anzahl von Feldern

$$\langle \phi_{a_1}(x) \dots \phi_{a_{2n}}(x) \rangle_c^0 = \frac{\partial^{2n} W^\circ}{\partial J_{a_1} \dots \partial J_{a_{2n}}}(0)$$

beschränken.

Für Maße, die unter einer Symmetriegruppe invariant sind, gibt es Beziehungen zwischen verschiedenen Erwartungswerten. Für ein  $O(N)$ -invariantes Maß ist beispielsweise

$$\langle \phi_i^n \rangle^0 = \langle \phi_j^n \rangle^0 .$$

Daher ist

$$\langle (\phi_1 + \phi_2)^2 \rangle^0 = 2\langle \phi_1^2 \rangle^0 + \langle \phi_1 \phi_2 \rangle^0 = 2\langle \phi_1^2 \rangle^0 .$$

Etwas subtiler sind die Beziehungen mit nichttrivialen gemischten Erwartungswerten.

$$\langle (\vec{\phi}^2)^2 \rangle^0 = \langle (\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 \rangle^0 = 2\langle \phi_1^4 \rangle^0 + 2\langle \phi_1^2 \phi_2^2 \rangle^0$$

Man sieht dies etwa durch die Benutzung von Polarkoordinaten für  $N = 2$ :

$$\langle \phi_1^4 \rangle = \int_0^\infty g(\phi) \int_0^{2\pi} \phi^4 \cos^4 \varphi \, d\varphi \, \phi \, d\phi = 2\pi \frac{3}{8} \int_0^\infty g(\phi) \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi^4 d\varphi \, \phi \, d\phi = \frac{3}{8} \langle (\vec{\phi}^2)^2 \rangle$$

und entsprechend

$$\langle \phi_1^2 \phi_2^2 \rangle = \int_0^\infty g(\phi) \int_0^{2\pi} \phi^4 \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi \, d\varphi \, \phi \, d\phi = \frac{1}{8} \langle (\vec{\phi}^2)^2 \rangle .$$

Für die LCE benötigt man Erwartungswerte von Produkten von Feldern. Diese sollen möglichst effizient berechnet werden. Daher ist es nützlich, die Relationen zwischen Erwartungswerten auszunutzen und alle auf eine Standardform zurückzuführen.

Dazu macht man sich zunächst die algebraische Struktur der Erwartungswerte klar. Aus der  $O(N)$ -Invarianz des Maßes folgt in der symmetrischen Phase für eine beliebige orthogonale Matrix  $O$ :

$$\langle \phi_{a_1} \dots \phi_{a_{2n}} \rangle_c^0 = \langle (O\phi)_{a_1} \dots (O\phi)_{a_{2n}} \rangle_c^0 = O_{a_1 b_1} \dots O_{a_{2n} b_{2n}} \langle \phi_{b_1} \dots \phi_{b_{2n}} \rangle_c^0 .$$

Für  $n = 1$  ist also

$$\langle \phi_{a_1} \phi_{a_2} \rangle_c^0 = O_{a_1 b_1} O_{a_2 b_2} \langle \phi_{b_1} \phi_{b_2} \rangle_c^0 = O_{a_1 b_1} \langle \phi_{b_1} \phi_{b_2} \rangle_c^0 O_{b_2 a_2}^T$$

oder, mit  $G_{ab} = \langle \phi_a \phi_b \rangle_c^0$

$$\forall O \in O(N) : OGO^T = G .$$

Daraus kann man bereits schließen, daß  $G$  proportional zur Einheitsmatrix ist, d.h.

$$\langle \phi_a \phi_b \rangle_c^0 = \alpha \delta_{ab} .$$

Für  $n = 1$  ist dieses Ergebnis trivial, weil man es dem Integral für den Erwartungswert direkt ansieht. Denn wenn  $a \neq b$  ist, kommen  $\phi_a$  und  $\phi_b$  mit einer ungeraden Potenz vor, deswegen verschwindet der Erwartungswert. Für die Erwartungswerte mit größeren Anzahlen von Feldern ist die analytische Argumentation jedoch aufwendiger und die Abspaltung der algebraischen Struktur erspart die Berechnung aufwendiger Integrale.

Der Erwartungswert

$$\langle \phi_{a_1} \dots \phi_{a_{2n}} \rangle_c^0$$

ist also ein  $O(N)$ -symmetrischer Tensor und invariant unter beliebigen Permutationen der Indizes. Ferner verschwindet die Erwartungswert, wenn irgendeiner der Indizes mit ungerader Häufigkeit auftritt.

Die total symmetrischen  $O(N)$ -invarianten Tensoren  $C_{2n}$  werden nun rekursiv definiert:

$$\begin{aligned} C_0 &:= 1 \\ C_{2n}(a_1, \dots, a_{2n}) &:= \sum_{i=2}^{2n} \delta_{a_1, a_i} C_{2n-2}(a_2, \dots, \hat{a}_i, \dots, a_{2n}) \end{aligned}$$

Es ist also

$$C_2(a_1, a_2) = \delta_{a_1, a_2}$$

und

$$C_4(a_1, a_2, a_3, a_4) = \delta_{a_1 a_2} \delta_{a_3 a_4} + \delta_{a_1 a_3} \delta_{a_2 a_4} + \delta_{a_1 a_4} \delta_{a_2 a_3}$$

und entsprechend für größere  $n$ .

Durch auflösen der rekursiven Definition sieht man, daß die Summe in  $C_{2n}$  aus genau  $(2n - 1)!!$  Termen besteht, und es gilt

$$C_{2n}(a, \dots, a) = (2n - 1)!! .$$

Es ist nämlich  $C_2(a, a) = 1$  und

$$C_{2n+2}(a, \dots, a) = \sum_{i=2}^{2n+2} \delta_{a,a} C_{2n}(a, \dots, a) = (2n + 1) \cdot (2n - 1)!!$$

$C_{2n}$  ist invariant unter beliebigen Permutationen der Indizes  $a_1, \dots, a_{2n}$ , was man der rekursiven Form induktiv abliest. Ferner gilt  $C_{2n}(i, \dots, i) = C_{2n}(j, \dots, j)$ .

Damit hat  $C_{2n}$  die gleiche Tensorstruktur wie  $\langle \phi_{a_1} \dots \phi_{a_{2n}} \rangle_c^0$ . Beide sind daher proportional. Die Proportionalitätskonstante  $\alpha$  bestimmt man durch einsetzen von gleichen Indizes:

$$\langle \phi_1^{2n} \rangle_c^0 = \alpha C_{2n}(1, \dots, 1) = \alpha (2n - 1)!! \Rightarrow \alpha = \langle \phi_1^{2n} \rangle_c^0 \frac{1}{(2n - 1)!!} .$$

Mit diesen Tensoren gilt also

$$\langle \phi_{a_1} \dots \phi_{a_{2n}} \rangle_c^0 = \frac{C_{2n}(a_1, \dots, a_{2n})}{(2n - 1)!!} \langle \phi_1^{2n} \rangle_c^0 .$$

Für  $N = 1$  sind automatisch alle Indizes gleich. Die Gleichung ist auch in diesem Fall konstistent.

Für die Momente der nulldimensionalen Theorie führt man die folgende Abkürzung ein:

$$v_{2n,J}^0 := \langle \phi_1^{2n} \rangle_{c,J} = \frac{\partial^{2n} W^\circ}{\partial J_1^{2n}}(J)$$

und

$$v_{2n}^0 := \langle \phi_1^{2n} \rangle_c = \frac{\partial^{2n} W^\circ}{\partial J_1^{2n}}(0) .$$

### 3.3.2 Linked Cluster Entwicklung: Beispiel

In diesem Abschnitt wird zur Erläuterung die LCE in niedriger Ordnung für den Fall  $N = 1$  berechnet. Anhand dieser Beispiele wird die Systematik der LCE eingeführt. Die Verallgemeinerung, die für  $N$ -Komponenten-Modelle nötig ist, ist dann relativ einfach.

Die Taylorentwicklung von  $W$  ist in diesen Fall ( $N = 1$ ,  $|\Lambda| < \infty$ ):

$$\begin{aligned} W(J, v) &= W(J, 0) + \sum_{x_1, x_2 \in \Lambda} \frac{\partial W}{\partial v(x_1, x_2)}(J, 0) v(x_1, x_2) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{x_1, \dots, x_4 \in \Lambda} \frac{\partial^2 W}{\partial v(x_1, x_2) \partial v(x_3, x_4)}(J, 0) v(x_1, x_2) v(x_3, x_4) + \mathcal{O}(v^3) \end{aligned}$$

Das erste Problem ist die Bestimmung der Koeffizienten der Entwicklung, also die Berechnung mehrfacher Ableitungen nach der Zweipunktkopplung. Man erhält für eine Ableitung

$$\frac{\partial W}{\partial v(x, y)}(J, v) = \frac{1}{2} \langle \phi(x) \phi(y) \rangle_J . \quad (3.3)$$

Diesen Ausdruck kann man durch die Beziehung

$$\langle \phi(x) \phi(y) \rangle_J = \langle \phi(x) \phi(y) \rangle_{c,J} + \langle \phi(x) \rangle_{c,J} \langle \phi(y) \rangle_{c,J}$$

zwischen Korrelationsfunktionen und ihren Kumulantenelementen wieder durch Ableitungen nach der Quelle  $J$  auszudrücken.

$$\frac{\partial W}{\partial v(x, y)}(J, v) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 W}{\partial J(x) \partial J(y)}(J, v) + \frac{\partial W}{\partial J(x)}(J, v) \frac{\partial W}{\partial J(y)}(J, v) \right) \quad (3.4)$$

#### Linked Cluster Entwicklung: 1. Ordnung

Die Koeffizienten der Taylorentwicklung werden mit Hilfe der erzeugenden Formel (3.4) berechnet. Für  $v = 0$  reduzieren sich die Kumulantenelemente auf die folgende Form:

$$\langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle_{c,J}^0 = \delta_{x_1, \dots, x_n} \frac{\partial^n W^0}{\partial J(x_1)^n}(J(x_1)) . \quad (3.5)$$

Für den Term 1. Ordnung bedeutet dies, wenn man noch  $v(x_1, x_2) = 0$  für  $x_1 = x_2$  berücksichtigt:

$$\frac{\partial W}{\partial v(x_1, x_2)}(J, 0) v(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \langle \phi(x_1) \rangle_{c,J}^0 \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x_2)$$

Für den Term erster Ordnung erhält man

$$\sum_{xy} \frac{\partial W}{\partial v(x_1, x_2)}(J, 0) v(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \sum_{x_1 x_2} \langle \phi(x_1) \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x_2) \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0.$$

Graphisch wird dies durch

$$\sum_{x_1 x_2} \frac{\partial W}{\partial v(x_1, x_2)}(J, 0) v(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \bullet - \bullet$$

(3.6)

notiert, wobei die ausgefüllten Punkte eine Summation über das gesamte Gitter implizieren.

### Linked Cluster Entwicklung: 2. Ordnung

In zweiter Ordnung ist

$$\frac{\partial^2 W}{\partial v(x_1, x_2) \partial v(x_3, x_4)}(J, v) v(x_1, x_2) v(x_3, x_4)$$

zu berechnen. Man wendet Formel (3.4) zwei Mal an und erhält

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 W}{\partial v(x_1, x_2) \partial v(x_3, x_4)}(J, v) \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial J(x_3) \partial J(x_4)} + \frac{\partial W}{\partial J(x_4)} \frac{\partial}{\partial J(x_3)} + \frac{\partial W}{\partial J(x_3)} \frac{\partial}{\partial J(x_4)} \right) \frac{\partial}{\partial v(x_1, x_2)} W(J, v) \\ &= \frac{1}{4} \left( \frac{\partial^2}{\partial J(x_3) \partial J(x_4)} + \frac{\partial W}{\partial J(x_4)} \frac{\partial}{\partial J(x_3)} + \frac{\partial W}{\partial J(x_3)} \frac{\partial}{\partial J(x_4)} \right) \\ & \quad \left( \frac{\partial^2 W}{\partial J(x_1) \partial J(x_2)} + \frac{\partial W}{\partial J(x_1)} \frac{\partial W}{\partial J(x_2)} \right) \end{aligned}$$

Für  $v = 0$  erhält man unter Beachtung von (3.5)

$$\begin{aligned} & 4 \frac{\partial^2 W}{\partial v(x_1, x_2) \partial v(x_3, x_4)}(J, 0) v(x_1, x_2) v(x_3, x_4) \\ &= (\delta_{x_2 x_3} \delta_{x_1 x_4} + \delta_{x_1 x_3} \delta_{x_2 x_4}) \langle \phi(x_1)^2 \rangle_{c,J}^0 \langle \phi(x_2)^2 \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x_2) v(x_3, x_4) \\ & \quad + \langle \phi(x_1)^2 \rangle_{c,J}^0 \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0 (\delta_{x_1 x_3} \langle \phi(x_4) \rangle_{c,J}^0 + \delta_{x_1 x_4} \langle \phi(x_3) \rangle_{c,J}^0) v(x_1, x_2) v(x_3, x_4) \\ & \quad + \langle \phi(x_2)^2 \rangle_{c,J}^0 \langle \phi(x_1) \rangle_{c,J}^0 (\delta_{x_2 x_3} \langle \phi(x_4) \rangle_{c,J}^0 + \delta_{x_2 x_4} \langle \phi(x_3) \rangle_{c,J}^0) v(x_1, x_2) v(x_3, x_4) \end{aligned}$$

Aufsummiert ergibt dies

$$\frac{1}{2} \sum_{x_1, \dots, x_4} \frac{\partial^2 W}{\partial v(x_1, x_2) \partial v(x_3, x_4)}(J, 0) v(x_1, x_2) v(x_3, x_4) =$$

$$\frac{1}{4} \sum_{xy} \langle \phi(x)^2 \rangle_{c,J}^0 v(x, y)^2 \langle \phi(y)^2 \rangle_{c,J}^0 + \frac{1}{2} \sum_{xyz} \langle \phi(x) \rangle_{c,J}^0 v(x, y) \langle \phi(y) \rangle_{c,J}^0 v(y, z) \langle \phi(z) \rangle_{c,J}^0.$$

Dies notiert man wieder graphisch als

$$\frac{1}{2} \sum_{x_1, \dots, x_4} \frac{\partial^2 W}{\partial v(x_1, x_2) \partial v(x_3, x_4)}(J, 0) v(x_1, x_2) v(x_3, x_4) =$$

$$\frac{1}{4} \bullet \bullet + \frac{1}{2} \bullet \bullet \bullet ,$$

wobei ausgefüllte Punkte jeweils wieder die Summation über das Gitter implizieren.

Insgesamt erhält man

$$W(J, v) = W(J, 0) + \frac{1}{2} \bullet \bullet + \frac{1}{4} \bullet \bullet + \frac{1}{2} \bullet \bullet \bullet + \mathcal{O}(v^3)$$

Man erkennt die Systematik der Clusterentwicklung und kann eine entsprechende Hypothese aufstellen und diese beweisen [Wor74]. Zu graphentheoretischen Begriffen siehe Anhang B.

*Die Regel zur Berechnung der freien Energie mit der LCE lautet nun, daß zur n-ten Ordnung alle zusammenhängenden Graphen mit n Kanten ohne äußere Vertices gehören. Man numeriert die Vertices durch und schreibt für jede Kante von i nach j einen Faktor  $v(x_i, x_j)$ . Zu jedem n-wertigen Vertex gehört ein Faktor  $\langle \phi(x_i)^n \rangle_{c,J}^0$ . Jeder interne Vertex wird über das ganze Gitter summiert und dieser Beitrag durch den Symmetriefaktor des Graphen geteilt.*

$$W(J, v) = \bullet + \frac{1}{2} \bullet + \frac{1}{4} \bullet + \frac{1}{2} \bullet + \frac{1}{12} \bullet + \frac{1}{6} \bullet + \frac{1}{2} \bullet + \frac{1}{6} \bullet + \frac{1}{2} \bullet + \frac{1}{12} \bullet + \frac{1}{2} \bullet + \frac{1}{6} \bullet + \frac{1}{2} \bullet + \mathcal{O}(v^4) \quad (3.7)$$

Die Erzeugung der Reihenkoeffizienten ist nun ein Problem der Erzeugung aller relevanten Graphen, aus denen dann algorithmisch die zugehörigen Koeffizienten berechnet werden. Ob dies allerdings praktikabel ist, kann man der Entwicklung in dieser Form nicht ansehen. Es zeigt sich, daß man erst noch weitere Umformungen der Reihe vornehmen muß, um den Aufwand der Graphenerzeugung auf ein Maß zu reduzieren, das genügend hohe Ordnungen zuläßt.

### Homogenes äußeres Feld und nächste-Nachbar-Wechselwirkung

Die Entwicklung vereinfacht sich, wenn man annimmt, daß das Feld  $J$  homogen ist, d.h.  $\forall x \in \Lambda : J(x) = j$ , und zunächst Translationsinvarianz der Zweipunktkopplung annimmt.

$$\begin{aligned} W(J, v) &= W(J, 0)|\Lambda| + \frac{1}{2} \left( \langle \phi \rangle_{c,J}^0 \right)^2 \sum_x v(0, x)|\Lambda| + \\ &\quad \frac{1}{4} \left( \langle \phi^2 \rangle_{c,J}^0 \right)^2 \sum_x v(0, x)^2 |\Lambda| + \frac{1}{2} \left( \langle \phi \rangle_{c,J}^0 \right)^2 \langle \phi^2 \rangle_{c,J}^0 \left( \sum_x v(0, x) \right)^2 |\Lambda| + \mathcal{O}(v^3) \end{aligned}$$

Nimmt man nun  $v$  noch als Kopplung nächster Nachbarn mit Hopping-Parameter  $\kappa$  an, das Gitter habe ferner die Koordinationszahl  $q$  (Anzahl nächster Nachbarn eines Gitterpunktes), so bekommt man

$$\begin{aligned} \frac{W(J, v)}{|\Lambda|} &= W(J, 0) + \frac{1}{2} \left( \langle \phi \rangle_{c,J}^0 \right)^2 q\kappa + \\ &\quad \frac{1}{4} \left( \langle \phi^2 \rangle_{c,J}^0 \right)^2 q\kappa^2 + \frac{1}{2} \left( \langle \phi \rangle_{c,J}^0 \right)^2 \langle \phi^2 \rangle_{c,J}^0 q^2 \kappa^2 + \mathcal{O}(\kappa^3). \end{aligned}$$

### Linked Cluster Entwicklung: Kumulanten

Kumulanten erhält man durch Ableiten von  $W(J, v)$  nach der Quelle  $J$ . Die **Einpunktfunktion**  $\langle \phi(x) \rangle_{c,J}$  erhält man durch eine Ableitung nach  $J(x)$  und die Graphen ihrer Entwicklung entsprechen dann den Graphen (3.7) aus der LCE der freien Energie, in denen ein Vertex ein äußerer Vertex mit Index  $x$  ist.

$$\begin{aligned} \langle \phi(x) \rangle_{c,J} = & \text{Diagramm 1: Einzelner Vertex (leerer Kreis)} + \text{Diagramm 2: Zwei benachbarte Vertices (ein vertikaler Strich zwischen zwei leeren Kreisen)} + \text{Diagramm 3: Drei benachbarte Vertices (vertikale Striche zwischen drei leeren Kreisen)} + \dots + \text{Diagramm 10: Zehn benachbarte Vertices (neun vertikale Striche zwischen zehn leeren Kreisen)} + \mathcal{O}(v^4) \\ & \text{Diagramm 11: Einzelner Vertex (schwarzer Kreis)} + \text{Diagramm 12: Zwei benachbarte Vertices (vertikaler Strich zwischen einem schwarzen und einem leeren Kreis)} + \text{Diagramm 13: Drei benachbarte Vertices (vertikale Striche zwischen einem schwarzen und zwei leeren Kreisen)} + \dots + \text{Diagramm 20: Zehn benachbarte Vertices (neun vertikale Striche zwischen einem schwarzen und neun leeren Kreisen)} \end{aligned}$$

Ganz entsprechend lautet die Entwicklung für  $\langle \phi(x)^n \rangle_{c,J}$ . Jeder  $l$ -wertige externe Vertex steht dann für einen Faktor  $\langle \phi(x)^{n+l} \rangle_{c,J}^0$ . Über externe Vertices wird nicht summiert, die übrigen Regeln zur Berechnung der LCE sind die gleichen, wie bei der Entwicklung von  $W$ .

Als weiteres Beispiel betrachten wir die **Zweipunktfunktion**. Der erste Term auf der rechten Seite der Entwicklung (3.7) enthält nur einen Vertex. Dieser wird zweimal differenziert und man erhält die Kumulante der ultralokalen Theorie. Diese

Kumulante ist nur dann ungleich Null, wenn sie für übereinstimmende Punkte berechnet wird.

Betrachtet man nun den Term erster Ordnung der Entwicklung der freien Energie und wendet die Ableitungen nach  $J(x)$  und  $J(y)$  darauf an, so erhält man

$$\frac{\partial^2}{\partial J(x)\partial J(y)} \bullet - \bullet = \frac{\partial^2}{\partial J(x)\partial J(y)} \sum_{x_1 x_2} \langle \phi(x_1) \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x_2) \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0 .$$

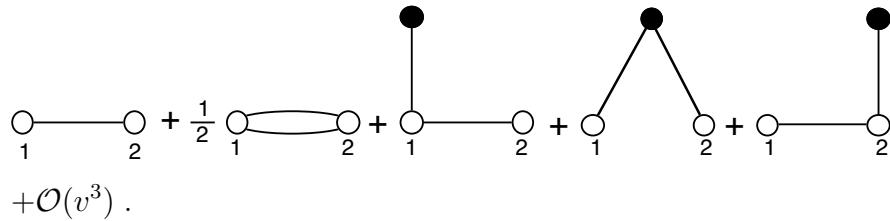
Mit der Produktregel und der Symmetrie von  $v$  findet man

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2}{\partial J(x)\partial J(y)} \sum_{x_1 x_2} \langle \phi(x_1) \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x_2) \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0 \\ &= 2 \sum_{x_1 x_2} \langle \phi(x_1) \phi(x) \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x_2) \langle \phi(x_2) \phi(y) \rangle_{c,J}^0 + \\ & \quad 2 \sum_{x_1 x_2} \langle \phi(x_1) \phi(x) \phi(y) \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x_2) \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0 \\ &= 2 \langle \phi(x)^2 \rangle_{c,J}^0 v(x, y) \langle \phi(y)^2 \rangle_{c,J}^0 + 2 \delta_{xy} \langle \phi(x)^3 \rangle_{c,J} \sum_{x_1} v(x, x_1) \langle \phi(x_1) \rangle_{c,J} \end{aligned}$$

Durch die Differenzierung entstehen also zwei Typen von Graphen. Einmal solche, die zwei äußere Vertices enthalten an denen eine Differenzierung vorgenommen wurde und solche, die einen äußeren Vertex enthalten, an dem zwei Differenzierungen vorgenommen wurden. Letztere entsprechen den Graphen der Einpunktfunction, wenn an jedem äußeren Vertex zwei Differenzierungen durchgeführt werden.

Dies gilt auch für die höheren Ordnungen der Entwicklung. Die Graphen, die zur Einpunktfunction gehörten, faßt man zusammen und erhält in zweiter Ordnung

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle_c = \delta_{x_1 x_2} \langle \phi(x_1)^2 \rangle_c +$$



$\langle \phi(x_1)^2 \rangle_c$  ist dabei die Reihe der Einpunktfunction bis zur Ordnung  $v^3$ .

Für die Berechnung der interessierenden Größen (siehe 2.3.2) muß man auch noch höhere Kumulanten berechnen, bis hin zur 4-Punkt bzw. 6-Punkt-Funktion. Das Prinzip ist dabei immer das gleiche: Die Graphen der höheren Kumulanten bestehen aus denen der niedrigeren Kumulanten, bei denen einmal jeweils ein Vertex einmal

mehr differenziert wurde und die Anzahl der externen Vertices also gleich bleibt, und aus den Graphen, bei denen ein weiterer externer Vertex auftritt.

Man beachte auch, daß für den später zu berechnenden Fall  $J = 0$  die Reihen einfacher werden, weil alle Graphen, die einen Vertex mit ungerader Wertigkeit enthalten, keinen Beitrag liefern.

### 3.4 Berechnung der Reihenkoeffizienten für die $N$ -Komponenten-Theorie

Bei der Bestimmung der Koeffizienten  $w_m$  der Reihenentwicklung sind nun zusätzlich die inneren Freiheitsgrade zu berücksichtigen. Man erhält für eine Ableitung

$$\frac{\partial W}{\partial v_{a,b}(x,y)}(J,v) = \frac{1}{2} \langle \phi_a(x)\phi_b(y) \rangle_J . \quad (3.8)$$

Mit der Beziehung

$$\langle \phi_a(x)\phi_b(y) \rangle_J = \langle \phi_a(x)\phi_b(y) \rangle_{c,J} + \langle \phi_a(x) \rangle_{c,J} \langle \phi_b(y) \rangle_{c,J}$$

zwischen Korrelationsfunktionen und ihren Kumulantengruppen, drückt man dies wieder durch Ableitungen nach der Quelle  $J$  aus.

$$\frac{\partial W}{\partial v_{a,b}(x,y)}(J,v) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 W}{\partial J_a(x) \partial J_b(y)}(J,v) + \frac{\partial W}{\partial J_a(x)}(J,v) \frac{\partial W}{\partial J_b(y)}(J,v) \right) \quad (3.9)$$

Mit dieser Grundgleichung lassen sich induktiv höhere Ableitungen nach der Zweipunktkopplung auf Ableitungen nach der Quelle zurückführen.

#### 3.4.1 Regeln für die LCE für Modelle mit $N$ Komponenten

Man nutzt zweckmäßigerweise aus, daß  $v_{a,b}(x,y)$  proportional zu  $\delta_{a,b}$  ist, weil dann die Regel für die Graphen einfacher zu formulieren ist.

Die Regel zur Berechnung der freien Energie mit der LCE lautet nun, daß zur  $n$ -ten Ordnung alle verbundenen Graphen mit  $n$  Kanten ohne äußere Vertices gehören. Man numeriert jeweils die Vertices und die Kanten des Graphen durch und schreibt für jede Kante  $k$  von  $i$  nach  $j$  einen Faktor  $v_{a_k,a_k}(x_i, x_j)$ . Zu jedem  $n$ -wertigen Vertex, an dem die Kanten  $k_1, \dots, k_n$  enden, gehört ein Faktor  $\langle \phi_{a_{k_1}}(x_i) \dots \phi_{a_{k_n}}(x_i) \rangle_{c,J}^0$ . Jeder interne Vertex wird über das ganze Gitter summiert und die Indizes  $a_k$  der Kanten über die internen Freiheitsgrade  $1, \dots, N$ . Dieser Beitrag wird durch den Symmetriefaktor des Graphen geteilt.

Kumulanten erhält man aus der Regel für die freie Energie wieder durch Differenzierung. Die Regeln für die Erzeugung der Graphen bleiben die gleichen. Der Ausdruck zu einem Graphen ist mutatis mutandis von der gleichen Form wie beim Modell mit einer Komponente. Die Summation erstreckt sich insbesondere nicht nur über das Gitter, sondern auch über die internen Indizes, die zu jeder Kante des Graphen gehören.

Die Koeffizienten  $w_m$  erhält man, indem man im Ausdruck für die Graphen die Zweipunktkopplung  $v = 0$  setzt. Dann reduzieren sich die Kumulanten, die in den Ausdrücken für die Graphen vorkommen, auf die Erwartungswerte der ultralokalen Theorie.

### 3.5 Renormierte Linked Cluster Entwicklung

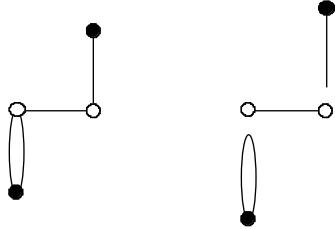
Weil die Zahl der Graphen bei der LCE mit der Ordnung stark wächst, ist es günstig, für die praktischen Berechnungen etwas mehr rechnerische Komplexität in Kauf zu nehmen, um die Zahl der Graphen langsamer mit der Ordnung steigen zu lassen. Die Berechnung der Gewichte ist in der bisher betrachteten nicht renormierten Form der LCE relativ einfach, weil man lediglich die Erwartungswerte der ultralokalen Theorie mit  $v = 0$  benötigt.

Unter der *renormierten Linked Cluster Entwicklung* versteht man eine Resummation der Reihe über Klassen von Graphen. Jede Klasse wird durch einen neuen Graphen repräsentiert, der jedem Klassenelement eindeutig zugeordnet ist. Die Beiträge der renormierten Graphen in der neuen Reihe sind natürlich komplizierter als diejenigen der unrenormierten Reihe, dafür sind weniger Graphen zu berechnen. Dieses Vorgehen ist natürlich nur dann nützlich, wenn dabei effektiv etwas gewonnen wird, also die Berechnung der Beiträge der neuen Graphen auf eine andere Art erfolgen kann, als durch simple Summation über die Beiträge der Klassenelemente.

Als weitere Reduktion der Komplexität betrachtet man 1PI-Graphen (One Particle Irreducible). Die Berechnung dieser Graphen und der zugehörigen Suszeptibilitäten ermöglicht bereits die Berechnung der normalen Suszeptibilitäten.

Hier betrachten wir aber eine weitergehende Zerlegung der Graphen in einen *Skelett*-Graphen und Einfügungen an den Vertices [Wor74]. Skelett-Graphen werden auch 1VI-Graphen genannt (One Vertex Irreducible, Anhang B). Zur Zweipunktfunktion

trägt z.B. der folgende Graph bei.



$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \sum_{x_1, x_2} \langle \phi(x)^4 \rangle_{c,J}^0 v(x, y) \langle \phi(y)^3 \rangle_{c,J}^0 v(x, x_1)^2 \langle \phi(x_1)^2 \rangle_{c,J}^0 v(x_2, x) \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0 \\
 &= \left( \frac{1}{2} \sum_{x_1, x_2} \langle \phi(x_1^2) \rangle_{c,J}^0 v(x_1, x)^2 \right) \underbrace{\langle \phi(x)^4 \rangle_{c,J}^0 v(x, y) \langle \phi(y)^3 \rangle_{c,J}^0}_{\text{Skelett-Term}} \left( \sum_{x_2} v(y, x_2) \langle \phi(x_2) \rangle_{c,J}^0 \right)
 \end{aligned}$$

Man sieht, daß der Graph in den Skelett-Term und die Einfügungen faktorisiert. Wie in [Wor74] definiert man das Selbstfeld (self-field)  $G_n(x_i)$  durch die Summe aller topologisch verschiedenen  $n$ -wertigen 1-Einsetzungen. Mit Hilfe der  $G_n$  kann man den Gesamtbeitrag aller möglichen Ergänzungen von 1-Einsetzungen an einem Vertex des Skelett-Graphen berechnen.

Dies führt zu den renormierten Vertices

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_1(x_i)^n \rangle_{c,J}^r &:= \langle \phi_1(x_i)^n \rangle_{c,J}^0 + \sum_{l=1}^{\infty} G_l(x_i) \langle \phi_1(x_i)^{n+l} \rangle_{c,J}^0 \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{l,m=1}^{\infty} G_l(x_i) G_m(x_i) \langle \phi_1(x_i)^{n+m+l} \rangle_{c,J}^0 + \dots \\
 &= \exp \left( \sum_{l=1}^{\infty} G_l(x_i) \frac{\partial^l}{\partial J_1^l} \right) \langle \phi_1(x_i)^n \rangle_{c,J}^0
 \end{aligned}$$

Die Ersetzung aller Vertices des Skelett-Graphen durch renormierte Vertices entspricht nun der Summation über aller Graphen mit diesem Skelett-Graphen.

Die Menge der Graphen, die sowohl 1PI als auch 1VI sind,  $\mathcal{S}_k^{\text{ev}}(L)$ , sowie die Menge der 1PI-Graphen mit genau einem externen Vertex  $\mathcal{Q}_k^{\text{ev}}(L)$  sind die elementaren Bausteine der LCE-Reihen [Rei95a].

## 3.6 Linked Cluster Entwicklung der Suszeptibilitäten und der physikalischen Kopplungen

Für die Berechnung der Suszeptibilitäten kann man die allgemeine Theorie der LCE verlassen und den Fall  $J = 0$  betrachten. Dadurch fallen alle Graphen der LCE fort, bei denen ein Vertex mit einer ungeraden Anzahl von einfallenden Linien vorkommt.

Wie hängen die im Rahmen der LCE zugänglichen Korrelationsfunktionen mit den Größen, die bei der Berechnung kritischer Eigenschaften eine Rolle spielen und den physikalischen Kopplungen zusammen?

Die physikalischen Kopplungen lassen sich im Rahmen der LCE bequem durch die in Kapitel 2 angegebene Zusammenhänge mit den Suszeptibilitäten berechnen. Die Definition der Suszeptibilitäten enthält nur zusammenhängende Greensche Funktionen, für diese die LCE bekannt ist.

$$\begin{aligned}\chi_2 &:= \sum_x \langle \phi(x) \phi(0) \rangle_c \\ \chi_4 &:= \sum_{x_1, x_2, x_3} \langle \phi(x_1) \phi(x_2) \phi(x_3) \phi(0) \rangle_c \\ \mu^2 &:= \sum_x x^2 \langle \phi(x) \phi(0) \rangle_c\end{aligned}$$

### 3.6.1 1PI-Suszeptibilitäten

Die Zahl der Graphen der zugehörigen 1PI-Funktionen ist die geringste von allen betrachteten Funktionen, daher sind die 1PI-Suszeptibilitäten am besten für die numerische Berechnung geeignet. Ferner erspart man sich bei den 1PI-Suszeptibilitäten die Aufsummation der zusammenhängenden Greenschen Funktionen aus den 1PI-Funktionen. Stattdessen werden die zusammenhängenden Suszeptibilitäten aus ihnen durch einfache algebraische Beziehungen berechnet.

Die Programme von Reisz zur Berechnung der LCE berechnen diese 1PI-Suszeptibilitäten. Sie benötigen als Eingabedateien die Daten  $\mathcal{S}_k^{\text{ev}}(L)$  und  $\mathcal{Q}_k^{\text{ev}}(L)$  der Graphen, welche vorab berechnet werden. Die Erzeugung dieser Graphen ist mit einem gewissen Aufwand verbunden. In [Rei95a] wird das Vorgehen beschrieben.

Zwischen den 1PI-Suszeptibilitäten und den normalen Suszeptibilitäten bestehen die folgenden Zusammenhänge [Por97, PR97b]:

$$\chi_2 = \frac{\chi_2^{1PI}}{1 - (2\kappa)(2d)\chi_2^{1PI}} \quad (3.10)$$

$$\mu^2 = \frac{\mu_2^{1PI} + (2\kappa)(2d_r)(\chi_2^{1PI})^2}{(1 - (2\kappa)(2d)\chi_2^{1PI})^2} \quad (3.11)$$

$$\chi_4 = \frac{\chi_4^{1PI}}{(1 - (2\kappa)(2d)\chi_2^{1PI})^4} \quad (3.12)$$

$$\chi_6 = \frac{\chi_6^{1PI} + 10(2\kappa)(2d)\frac{(\chi_4^{1PI})^2}{(1 - (2\kappa)(2d)\chi_2^{1PI})^4}}{(1 - (2\kappa)(2d)\chi_2^{1PI})^6} \quad (3.13)$$

Wie auch in [Rei95a, Rei95b] betont, ist der geringere technische Aufwand aber nicht der einzige Vorteil dieses Vorgehens. Auch die Genauigkeit der Berechnung kritischer Größen wird verbessert. So ist z.B.  $\chi_2$  an der kritischen Linie divergent. Gl. (3.10) zeigt, daß dies zur Nullstelle des Nenners gehört.  $\chi_2^{1PI}$  ist also endlich.

Für die physikalischen Kopplungen bestehen die folgenden Zusammenhänge, die in Kapitel 2 berechnet wurden,

$$m_r^2 = 2d \frac{\chi_2}{\mu_2}, \quad Z_r = 2d \frac{\chi_2^2}{\mu_2}, \quad g_r = -\left(\frac{2d}{\mu_2}\right)^2 \chi_4,$$

und damit ist man nun in der Lage, aus gegebenen Kopplungen  $\kappa, \lambda, \sigma, \dots$  die zugehörigen physikalischen Kopplungen zu berechnen.



# KAPITEL 4

---

## Kombination mit der Renormierungsgruppe

---

„One cannot write a renormalization cookbook.“

K. G. Wilson, 1976, [NvL76]

Da die LCE für ein kritisches System nicht konvergiert, muß man sie zur Extraktion kritischer Größen mit anderen Verfahren kombinieren. Man kann sie z.B. aufgrund des erwarteten nicht-analytischen Verhaltens am kritischen Punkt extrapolieren [Rei95b, BC97, Gut89].

In diesem Kapitel wird als Alternative die Kombination der LCE mit einer Renormierungsgruppentransformation diskutiert.

### 4.1 Die zugrundeliegende Idee

Die Kopplungen der Wirkung bzw. der Hamiltonfunktion seien zusammengefaßt kurz mit  $K$  bezeichnet. Im bisher betrachteten System ist  $K = (\kappa, \lambda)$ . Eine RG-Transformation der Wirkung kann man auch durch den funktionalen Zusammenhang

$$K \mapsto K'(K) = \mathcal{R}(K)$$

angeben [NvL76]. Typischerweise erzeugt eine RG-Transformationen Kopplungen, die in der ursprünglichen Wirkung nicht enthalten waren.

Die lineare Näherung von  $\mathcal{R}$  an einem Punkt  $\tilde{K}$  ist

$$\mathcal{R}(K) = \tilde{K} + \mathbf{T}(\tilde{K})(K - \tilde{K}) + \mathcal{O}(|K - \tilde{K}|^2)$$

mit der Ableitung  $\mathbf{T}(\tilde{K}) = (T_{ij}(\tilde{K}))$  definiert durch

$$T_{ij}(\tilde{K}) := \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial K_j}(\tilde{K}) = \frac{\partial K'_i}{\partial K_j}(\tilde{K})$$

In der Nähe eines Fixpunktes  $K^*$  der RG-Transformation hat man also näherungsweise

$$\mathcal{R}(K) - K^* = \mathbf{T}^*(K - K^*) .$$

Der größte Eigenwert von  $\mathbf{T}^*$  ist  $L^{\frac{1}{\nu}}$  [Hua87, NvL76]. Betrachtet man im einfachsten Fall also den Fluß der Kopplung  $\kappa$ , so bekommt man

$$\kappa' - \kappa^* = L^{\frac{1}{\nu}}(\kappa - \kappa^*)$$

oder

$$\nu = \frac{\log L}{\log \left( \frac{\kappa' - \kappa^*}{\kappa - \kappa^*} \right)} \approx \frac{\log L}{\log \left( \frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} \right)} \quad (4.1)$$

als Schätzwert für  $\nu$ .

In diesem Kapitel soll die Theorie vorgestellt werden, mit der man RG-Flüsse mit Hilfe der LCE berechnen kann.

## 4.2 Die Durchführung: Vergleich mit der Monte-Carlo Renormierungsgruppe

Die Idee, die hier verfolgt werden soll, ähnelt der (alten) Monte-Carlo Renormierungsgruppe. Daher ist es vielleicht nützlich, sich diese Methode zum Vergleich anzuschauen.

Eine der ersten Ideen war die direkte Simulation der Fixpunkttheorie, d.h. einer Hamiltonfunktion mit vielen Kopplungen. Ma hat in [kM76] neben der nächste-Nachbar-Kopplung auch noch Kopplungen übernächster Nachbarn und eine Vier-Spin-Kopplung verwendet. Das Problem dabei ist, daß auf einem Rechner die Zahl der Kopplungen beschränkt werden muß. Der Raum der Kopplungen ist daher endlichdimensional und man kann nur eine Approximation des Fixpunktes simulieren. Für eine gute Approximation benötigt man einen großen Raum und die Probleme der Simulation steigen stark mit der Größe des Raumes.

Entsprechende Schwierigkeiten hat man bei der Behandlung von Theorien mit Hilfe der Clusterentwicklung: Das Einführen weiterer nicht-ultralokaler Kopplungen würde die Berechnung der Reihe verkomplizieren. Genauer gesagt ist das bisherige Verfahren der Clusterentwicklung, bei dem die Vereinfachung der Kopplung nächster Nachbarn ausgenutzt wurde, dann nicht mehr einsetzbar. Eine grundlegende Überarbeitung der Algorithmen wäre nötig und die Berechnung der Graphen würde entsprechend aufwendiger. Die Einführung weiterer ultralokaler Kopplungen ist vergleichsweise einfach, denn sie macht sich bei der Berechnung der Reihen nur als zusätzlicher Parameter bei der Berechnung der renormierten Vertices per numerischer Integration bemerkbar. Die Erzeugung und Untersuchung der RG-Flüsse wird aber auch in diesem Fall aufwendiger.

In beiden Fällen hat man das Problem zu lösen, daß die kritischen Theorie nicht zugänglich ist. Bei Monte-Carlo-Simulationen betrachtet man ein endliches Gitter, daher ist die Theorie nicht kritisch. Bei der LCE ist die kritische Linie die Grenze des Konvergenzbereiches, weshalb man einen gewissen Abstand von der kritischen Linie einhalten muß, um verlässliche Resultate zu erzielen.

Neuere Methode der Monte-Carlo-Renormierungsgruppe folgen Swendsen [Swe79b]. Dabei wird nur die ursprüngliche Hamiltonfunktion, nicht den Fixpunkt oder eine renormierte Hamiltonfunktion, simuliert. Auf diese simulierte Theorie wird dann ein RG-Schritt angewendet, um die renormierten Größen zu erhalten. Dadurch muß man nur den Parameterraum der ursprünglichen Hamiltonfunktion durchsuchen.

### 4.3 Definition der RG-Transformation

Als ersten Schritt muß man eine RG-Transformation definieren. Wie in der Einleitung angedeutet, braucht man dazu schon Wissen über das System. Die Wahl der RG-Transformation ist nicht kanonisch und man wählt sie nach Zweckmäßigkeit, wie leichter Berechenbarkeit oder Approximierbarkeit, und physikalischer Anschauung.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Regularität der RG-Transformation. Lineare Transformationen, d.h. solche, bei denen die geblockten Felder linear von den ursprünglichen abhängen, sind regulär [NvL76]. Hier wird eine lineare Transformation verwenden.

Die abstrakte Idee einer RG-Transformation ist die folgende. Zum (endlichen) Gitter  $\Lambda$  gehört eine Theorie, die durch ein Wahrscheinlichkeitsmaß

$$d\mu(\phi) = \frac{1}{Z} e^{-S(\phi)} d\lambda(\phi)$$

auf dem Raum aller (Gitter-) Felder gegeben ist. Für  $d\lambda$  wird meist auch

$$d\lambda(\phi) = \prod_{x \in \Lambda} \prod_{i=1}^N d\phi_i(x)$$

geschrieben und es ist das Lebesgue-Maß auf dem für endliche Gitter endlichdimensionalen Raum  $(\mathbb{R}^N)^\Lambda = \{\phi | \phi : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}^N\}$ . Dieses Lebesgue-Maß ist die a priori-Verteilung für den Hochtemperaturfall.

$(\mathbb{R}^N)^\Lambda$  ist für endliche Gitter sogar ein Hilbertraum mit Skalarprodukt

$$(\phi, \psi) = \sum_{x \in \Lambda} \sum_{a=1}^N \phi_a(x) \psi_a(x) .$$

Dieser werde mit  $\mathcal{H}(\Lambda)$  bezeichnet. Für unendliche Gitter besteht  $\mathcal{H}(\Lambda)$  aus allen Elementen von  $(\mathbb{R}^N)^\Lambda$ , deren durch das Skalarprodukt gegebene Norm endlich ist.

Man faßt nun Teilmengen („Blocks“) des Gitters zusammen und definiert eine Blockspin-Variable für jede Teilmenge. Dies kann auf ganz verschiedene Art und Weise erfolgen und eine der Hypothesen der RG-Theorie ist, daß die genaue Form der Definition nicht wesentlich ist, so lange die Definition physikalisch sinnvoll und nicht singulär ist. Eine Möglichkeit ist die Mittelbildung über den Block. Weitere Beispiele sind für das Ising-Modells die Majoritätsregel. Dabei wird die Anzahl der Variablen mit dem Wert „+1“ mit der Anzahl der Variablen mit dem Wert „−1“ verglichen und als Blockspin der Wert definiert, den die Mehrheit der Variablen hat. Bei der Dezimierungsregel wählt man aus jedem Block eine Variable aus und definiert diese als Blockspin. Diese Methode führt allerdings in vielen Fällen auf nicht befriedigende Resultate [Swe79a].

Aus dem Wahrscheinlichkeitsmaß für die ursprünglichen Zufallsvariablen kann man das Wahrscheinlichkeitsmaß für diese Blockvariablen berechnen. Dieses definiert implizit eine zugehörige (effektive) Wirkung durch

$$d\mu'(\bar{\phi}) = \frac{1}{Z'} e^{-S'(\bar{\phi})} d\lambda(\bar{\phi}) .$$

Durch Vergleich mit der ursprünglichen Wirkung erhält man den Fluß der nackten Kopplungen der Wirkung.

Die physikalische Idee dabei ist: Man spaltet die Felder in einen Teil, der zu kurzweligen Fluktuationen gehört, und einen Rest auf. Dann integriert man den Fluktuationsteil aus. Ein häufig benutzte Methode dazu ist der (ausgeschmierte)  $\delta$ -Blockspin [BW75], der im folgenden Teil beschrieben wird.

Für die mathematische Definition werden zunächst einige handliche Begriffe eingeführt. Sei  $\Lambda$  das Gitter, auf dem die Theorie definiert ist und  $\Lambda_L$  das Gitter, bei

dem die Punkte des Gitters  $\Lambda$ , die in Hyperblocks von je  $L^d$  Punkten liegen, zusammengefaßt werden. Für ein Gitter  $\Lambda = \mathbb{Z}^d$  und  $\Lambda_L = (L\mathbb{Z})^d$  schreibt man für  $x \in \Lambda$  und  $x' \in \Lambda_L$

$$x \underline{\in} x' : \Leftrightarrow x'_i \leq x_i < x'_i + L .$$

Für Gittertori, endliche Gitter mit periodischen Randbedingungen, wird eine sinngemäße Definition verwendet [GS96]. Zu jedem  $x \in \Lambda$  gibt es genau ein  $x' \in \Lambda_L$  mit

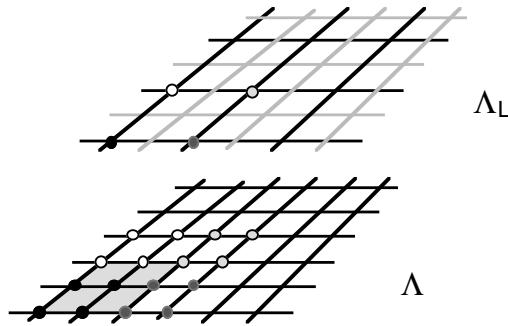


Abb. 4.1: Gitter  $\Lambda$ , Hyperblocks und geblocktes Gitter  $\Lambda_L$

$x \underline{\in} x'$ . Für dieses Element schreibt man auch  $[x]$ . Zur Definition der benutzten hierarchischen Strukturen siehe auch [Por93]. Entsprechend hat man für das geblockte Gitter  $\Lambda_L$  den Raum  $\mathcal{H}(\Lambda_L)$ .

Man definiert dann einen Gewichtsfaktor

$$P : \mathcal{H}(\Lambda) \times \mathcal{H}(\Lambda_L) \rightarrow \mathbb{R}$$

mit

$$P(\phi, \bar{\phi}) \geq 0$$

und

$$\sum \int d\lambda(\bar{\phi}) P(\phi, \bar{\phi}) = 1 .$$

An der letzten Zeile sieht man, daß ein solcher Gewichtsfaktor die Normierung des Wahrscheinlichkeitsmaßes erhält. Man fügt diese Zeile in die Gleichung für die erzeugende Funktion  $Z$  ein und vertauscht die Integrationen über die Felder auf  $\Lambda$  mit der für die Felder auf  $\Lambda_L$ . So erhält man die erzeugende Funktion für die Blockspins, mit der man die physikalische Situation äquivalent beschreiben kann.

Für die Definition der Gewichtsfunktion definiert man den Blockmitteloperator. Der Blockmitteloperator mittelt ein Feld auf  $\Lambda$  über die Hyperblocks mit der Blocklänge  $L$ . Es ist dann

$$\begin{aligned} C : \mathcal{H}(\Lambda) &\rightarrow \mathcal{H}(\Lambda_L) \\ \phi &\mapsto C\phi \end{aligned}$$

definiert durch

$$(C\phi)(\bar{x}) := \frac{1}{L^d} \sum_{x \in \bar{x}} \phi(x) .$$

Zu  $C$  gehört ein „adjungierter“ Operator bzgl. der Skalarprodukte in den Räumen  $\mathcal{H}(\Lambda)$  bzw.  $\mathcal{H}(\Lambda_L)$

$$\begin{aligned} C^+ : \mathcal{H}(\Lambda_L) &\rightarrow \mathcal{H}(\Lambda) \\ \bar{\phi} &\mapsto C^+ \bar{\phi} \end{aligned}$$

mit

$$(C^+ \bar{\phi})(x) = \bar{\phi}([x]) .$$

Dann ist

$$(\psi, C\phi)_{\Lambda_L} = \sum_{\bar{x} \in \Lambda_L} \sum_{a=1}^N \psi_a(\bar{x}) \frac{1}{L^d} \sum_{x \in \bar{x}} \phi_a(x) = \sum_{x \in \Lambda} \frac{1}{L^d} \psi([x]) \cdot \phi(x) = \frac{1}{L^d} (C^+ \psi, \phi)_{\Lambda} .$$

$C$  bildet also das Mittel des Feldes über einen Hyperblock und  $C^+$  gibt dem Feld auf dem feineren Gitter auf jedem Hyperblock den Wert des Feldes auf dem groberen Gitter. Es gilt daher

$$CC^+ = \mathbb{I}_{\Lambda_L} .$$

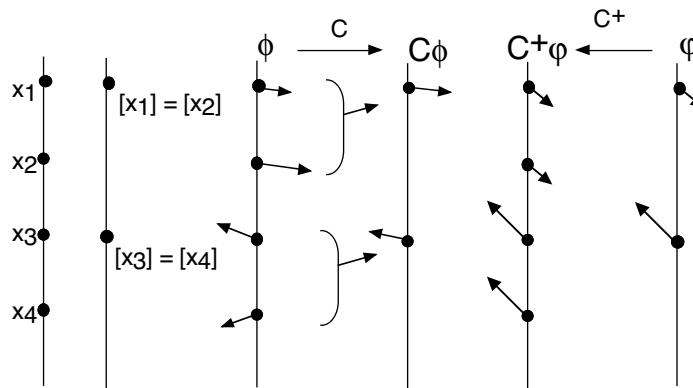


Abb. 4.2: Blockmittel-Operator

Die ausgeschmierte  $\delta$ -Blockspintransformation [Rei98c, BW75, BW74] ist durch den Gewichtsfaktor

$$P_{\alpha\beta} : \mathcal{H}(\Lambda) \times \mathcal{H}(\Lambda_L) \rightarrow \mathbb{R}$$

mit

$$P_{\alpha\beta}(\phi, \bar{\phi}) := \mathcal{N}_{\alpha\beta} \exp \left( -\frac{\alpha}{2} \left( \bar{\phi} - \frac{1}{\beta} C\phi, \bar{\phi} - \frac{1}{\beta} C\phi \right)_{\Lambda_L} \right) \quad (4.2)$$

definiert. Die Normierung  $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$  wird so gewählt, daß

$$\int \prod_{\bar{x} \in \Lambda_L} d\bar{\phi}(\bar{x}) P_{\alpha\beta}(\phi, \bar{\phi}) = 1$$

gilt. Der Blockspin hat dann eine Gaußverteilung um den mit  $\beta$  gewichteten Mittelwert des Feldes auf dem feineren Gitter. Die Breite der Gaußverteilung ist proportional zu  $\frac{1}{\alpha}$ . Für  $\alpha \rightarrow \infty$  wird der Gewichtsfaktor zu einem  $\delta$ -Maß, das  $\bar{\phi} = \frac{1}{\beta} C\phi$  erzwingt.  $\beta$  bestimmt, mit welchem Faktor das gemittelte Feld versehen wird.  $\beta = 1$  entspricht der Blockmittelbildung,  $\beta = L^{\frac{2-d-\eta}{2}}$  gehört zu skalaren Feldern mit anomaler Dimension  $\eta$ ,  $\eta = 0$  zu skalaren Feldern mit kanonischer Dimension. Zur Diskussion der anomalen Dimension in dieser Situation siehe z.B. [Wit98].

Für den Gewichtsfaktor gilt

$$P_{\alpha\beta}(\phi, \psi_1 + \psi_2) = P_{\alpha\beta}(\phi, \psi_1) e^{-\alpha(\psi_2, \psi_1 - \frac{1}{\beta} C\phi)_{\Lambda_L}} e^{-\frac{\alpha}{2}(\psi_2, \psi_2)_{\Lambda_L}}. \quad (4.3)$$

Durch Einfügen einer Eins erhält man

$$Z(J) = \int \prod_{x \in \Lambda} d^N \phi(x) \underbrace{\left( \int \prod_{y \in \Lambda_L} d^N \psi(y) P_{\alpha\beta}(\phi, \psi) \right)}_{=1} e^{-S_\Lambda(\phi) + (J, \phi)_\Lambda}.$$

Im nächsten Schritt werden die Integrationen über die beiden Felder vertauscht und eine Substitution durchgeführt

$$\begin{aligned} Z(J) &\stackrel{\psi \rightarrow \psi - \frac{1}{\alpha} J_L}{=} \int \prod_{y \in \Lambda_L} d^N \psi(y) \int \prod_{x \in \Lambda} d^N \phi(x) P_{\alpha\beta}(\phi, \psi) e^{-S_\Lambda(\phi) + (J, \phi)_\Lambda} \\ &\quad \exp \left( (J_L, \psi - \frac{1}{\beta} C\phi)_{\Lambda_L} \right) \exp \left( -\frac{1}{2\alpha} (J_L, J_L)_{\Lambda_L} \right) \\ &= \exp \left( -\frac{1}{2\alpha} (J_L, J_L)_{\Lambda_L} \right) \int \prod_{y \in \Lambda_L} d^N \psi(y) \\ &\quad \underbrace{\int \prod_{x \in \Lambda} d^N \phi(x) P_{\alpha\beta}(\phi, \psi) e^{-S_\Lambda(\phi)}}_{=: \exp(-\tilde{S}(\psi))} \exp \left( (J_L, \psi)_{\Lambda_L} \right) \\ &\quad \exp \left( (J, \phi)_\Lambda + (J_L, -\frac{1}{\beta} C\phi)_{\Lambda_L} \right) \end{aligned}$$

Den letzten Term kann man folgendermaßen umformen

$$(J, \phi)_\Lambda + (J_L, -\frac{1}{\beta} C\phi)_{\Lambda_L} = (J, \phi)_\Lambda - \frac{1}{\beta L^d} (C^+ J_L, \phi)_\Lambda .$$

Wählt man also

$$J = \frac{1}{\beta L^d} C^+ J_L$$

bzw.

$$J_L = \beta L^d C J ,$$

so verschwindet der letzte Exponent der resultierenden Gleichung und man erhält:

$$Z(J) = \exp \left( -\frac{1}{2\alpha} (J_L, J_L)_{\Lambda_L} \right) \int \prod_{y \in \Lambda_L} d^N \psi(y) \exp(-\tilde{S}(\psi) + (J_L, \psi)_{\Lambda_L}) \quad (4.4)$$

Für die erzeugende Funktion der zusammenhängenden Greenschen Funktionen gilt damit die folgende Skalenrelation

$$W(J) = \tilde{W}(J_L) - \frac{1}{2\alpha} (J_L, J_L)_{\Lambda_L} . \quad (4.5)$$

Die so gefundene Theorie ist für makroskopische Observable physikalisch äquivalent zur ursprünglichen. Es wurden lediglich andere Variablen („Blockspins“) definiert, mit denen man die Theorie makroskopisch genau so gut beschreiben kann.

Die zusätzliche Annahme der RG-Theorie ist, daß kritische Systeme skaleninvariant sind und man daher für die Kombination von Blockspin-Bildung und Reskalierung bei kritischen Systemen einen Fixpunkt der so definierten RG-Transformation erwartet. Daher wird im letzten Schritt die Theorie so reskaliert, daß sie wieder auf dem ursprünglichen Gitter  $\Lambda$  definiert ist. Dies definiert die gesuchte RG-Transformation.

Dazu muß man einen Skalierungsoperator für Felder einführen und dann Gleichung (4.4) durch reskalierte Felder ausdrücken. Für diesen Schritt ist es anschaulicher und bequemer, anzunehmen, daß die Theorie auf einem unendlich ausgedehnten Gitter  $\Lambda = \mathbb{Z}^d$  definiert ist, weil dann  $\mathcal{H}(\Lambda)$  und  $\mathcal{H}(\Lambda_L)$  isomorph sind. Jedoch existiert dann das oben zur Definition der Theorie benutzte Lebesgue-Maß nicht mehr. Man kann die Ausdrücke in eine mathematisch einwandfreie Form bringen, indem man Gauß-Maße benutzt. Hier wird aber die „Abkürzung“ der physikalischen Argumentation benutzt, ohne die mathematischen Details auszuarbeiten, indem der gleiche Ausdruck wie oben auch für unendliche Gitter weiterbenutzt wird.

Der Skalierungsoperator bildet ein Feld aus  $\mathcal{H}(\Lambda)$  auf eines aus  $\mathcal{H}(\Lambda_L)$  ab und ist definiert durch

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_L : \mathcal{H}(\Lambda) &\rightarrow \mathcal{H}(\Lambda_L) \\ \phi &\mapsto \mathcal{S}_L \phi \end{aligned}$$

mit

$$\mathcal{S}_L \phi(x') := \phi\left(\frac{x'}{L}\right) .$$

Mit  $\mathcal{S}_L$  kann man das Feld  $\psi = \mathcal{S}_L \varphi$  durch ein Feld auf  $\Lambda$  ersetzen und hat dann

$$Z(J) = \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}(J_L, J_L)_{\Lambda_L}\right) \int \prod_{y \in \Lambda} d^N \varphi(y) \exp(-\tilde{S}(\mathcal{S}_L \varphi) + (J_L, \mathcal{S}_L \varphi)_{\Lambda_L}) \quad (4.6)$$

Jetzt drückt man  $J_L$  ebenfalls durch ein Feld  $j$  auf  $\Lambda$  aus

$$J_L = \mathcal{S}_L j$$

und erhält dann mit

$$(\mathcal{S}_L j, \mathcal{S}_L \varphi)_{\Lambda_L} = \sum_{x \in \Lambda_L} j\left(\frac{x}{L}\right) \cdot \varphi\left(\frac{x}{L}\right) = \sum_{x \in \Lambda} j(x) \cdot \varphi(x) = (j, \varphi)_\Lambda$$

für die reskalierte Theorie

$$Z(J) = \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}(j, j)_\Lambda\right) \int \prod_{y \in \Lambda} d^N \varphi(y) \exp\left(-\underbrace{\tilde{S}(\mathcal{S}_L \varphi)}_{=: S'(\varphi)} + (j, \varphi)_\Lambda\right) . \quad (4.7)$$

Diese Gleichung definiert auch die renormierte Wirkung  $S'$  und damit den RG-Fluß der nackten Kopplungen. Für die erzeugende Funktion der zusammenhängenden Greenschen Funktionen gilt damit die folgende Skalenrelation

$$W(J) = W'(j) - \frac{1}{2\alpha}(j, j)_\Lambda . \quad (4.8)$$

Die Reskalierung ist u.a. deswegen sinnvoll, weil die Korrelationslänge der geblockten Theorie gleich der ungeblockten ist. Weil aber der Abstand der Gitterpunkte größer ist, ist sie in Einheiten der Gitterkonstanten um den Faktor  $\frac{1}{L}$  kleiner geworden. Durch die Reskalierung wird dies explizit sichtbar und man erkennt, daß die Korrelationslänge abnimmt bzw. die renormierte Masse zunimmt, wenn sie nicht unendlich bzw. null ist. Man sagt dann, die Theorie sei skaleninvariant.

## 4.4 Skalenrelationen

Aus der RG-Transformation der erzeugenden Funktionen  $Z$  und  $W$  erhält man die Skalenrelationen der Korrelationsfunktionen. Aus diesen wiederum erhält man die Skalenrelationen für die Suszeptibilitäten. Diese Rechnungen orientieren sich wieder nahe an [Rei98c].

Durch Ableiten erhält man die Skalenrelationen für die Greenschen Funktionen.

$$G_{n,a_1, \dots, a_n}^c(x_1, \dots, x_n) := \langle \phi_{a_1}(x_1) \dots \phi_{a_n}(x_n) \rangle_c = \frac{\partial^n W}{\partial J_{a_1}(x_1) \dots \partial J_{a_n}(x_n)}(0)$$

Es sollen der Vollständigkeit halber sowohl die Skalenrelationen der nicht reskalierten Theorie als auch die Skalenrelation der reskalierten Theorie hergeleitet werden.

Für die nicht reskalierte Theorie erhält man

$$\frac{\partial J(x)}{\partial J_L(\bar{x})} = \frac{1}{\beta L^d} \frac{\partial J_L([x])}{\partial J_L(\bar{x})} = \begin{cases} \frac{1}{\beta L^d} & : \bar{x} = [x] \Leftrightarrow x \in \bar{x} \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases},$$

und daraus folgt

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^n \tilde{W}}{\partial J_L(x'_1) \dots \partial J_L(x'_n)}(0) - \frac{1}{2\alpha} \frac{\partial^n (J_L, J_L)}{\partial J_L(x'_1) \dots \partial J_L(x'_n)} \Big|_{J_L=0} \\ &= \sum_{x_1, \dots, x_n \in \Lambda} \frac{\partial^n W}{\partial J(x_1) \dots \partial J(x_n)}(0) \frac{\partial J(x_1)}{\partial J_L(x'_1)} \dots \frac{\partial J(x_n)}{\partial J_L(x'_n)}. \end{aligned}$$

Für die Greenschen Funktionen gilt daher

$$\frac{1}{(\beta L^d)^n} \sum_{x_1 \in x'_1, \dots, x_n \in x'_n} G_n^c(x_1, \dots, x_n) = \tilde{G}_n^c(x'_1, \dots, x'_n) - \frac{1}{\alpha} \delta_{n,2} \delta_{x'_1, x'_2}. \quad (4.9)$$

Für die reskalierte Theorie bekommt man analog

$$\frac{\partial J(x)}{\partial j(x')} = \frac{1}{\beta L^d} \frac{\partial j(\frac{[x]}{L})}{\partial j(x')} = \begin{cases} \frac{1}{\beta L^d} & : x' = \frac{[x]}{L} \Leftrightarrow x \in Lx' \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

und daraus

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^n W'}{\partial j(x'_1) \dots \partial j(x'_n)}(0) - \frac{1}{2\alpha} \frac{\partial^n (j, j)}{\partial j(x'_1) \dots \partial j(x'_n)} \Big|_{j=0} \\ &= \sum_{x_1, \dots, x_n \in \Lambda} \frac{\partial^n W}{\partial J(x_1) \dots \partial J(x_n)}(0) \frac{\partial J(x_1)}{\partial j(x'_1)} \dots \frac{\partial J(x_n)}{\partial j(x'_n)} \end{aligned}$$

oder

$$\frac{1}{(\beta L^d)^n} \sum_{x_1 \in Lx'_1, \dots, x_n \in Lx'_n} G_n^c(x_1, \dots, x_n) = G'_n(x'_1, \dots, x'_n) - \frac{1}{\alpha} \delta_{n,2} \delta_{x'_1, x'_2}. \quad (4.10)$$

### 4.4.1 Skalenrelation der $n$ -Punkt-Suszeptibilitäten $\chi_n$

Die Skalenrelation der  $n$ -Punkt-Suszeptibilitäten

$$\chi_n(x_1) := \sum_{x_2, \dots, x_n \in \Lambda} G_n^c(x_1, \dots, x_n)$$

erhält man durch Summation von (4.10) über  $x'_2, \dots, x'_n \in \Lambda$ . Wenn man Translationsinvarianz ( $\chi_n(x) = \chi_n(y) =: \chi_n$ ) zugrunde legt, erhält man für  $n \geq 2$

$$\frac{1}{(\beta L^d)^n} \sum_{x_1 \in Lx'_1} \sum_{x_2, \dots, x_n \in \Lambda} G_n^c(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(\beta L^d)^n} \sum_{x_1 \in Lx'_1} \chi_n(x_1) = \chi'_n - \frac{1}{\alpha} \delta_{n,2}. \quad (4.11)$$

Die gesuchte Skalenrelation für die Suszeptibilitäten ist also

$$\frac{1}{\beta^n L^{d(n-1)}} \chi_n = \chi'_n - \frac{1}{\alpha} \delta_{n,2}. \quad (4.12)$$

Man beachte, daß sich die Suszeptibilitäten der reskalierten Theorie nicht von der nicht reskalierten Theorie unterscheiden. Für diese ergibt die Summation von (4.9) über  $x'_2, \dots, x'_n \in \Lambda_L$

$$\frac{1}{(\beta L^d)^n} \sum_{x_1 \in x'_1} \sum_{x_2, \dots, x_n \in \Lambda} G_n^c(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(\beta L^d)^n} \sum_{x_1 \in x'_1} \chi_n(x_1) = \tilde{\chi}_n - \frac{1}{\alpha} \delta_{n,2}. \quad (4.13)$$

Es gilt also

$$\tilde{\chi}_n = \chi'_n.$$

### 4.4.2 Skalenrelation von $\mu_2$

Die Herleitung der Skalenrelation der gewichteten Suszeptibilitäten ist etwas aufwendiger. Insbesondere wird die Skalenrelation von  $\mu_2$  benötigt. Zunächst wird die Beziehung zwischen der nicht reskalierten und der reskalierten Theorie erläutert. Oben wurde bereits festgestellt, daß die ungewichteten Suszeptibilitäten  $\chi_n$  sich in beiden Fällen nicht unterscheiden. Für die gewichtete Suszeptibilität  $\mu_2$  ist dies anders. Es sei Translationsinvarianz vorausgesetzt.  $\mu_2$  ist dann unabhängig vom Ort und durch

$$\mu_2 := \sum_{x \in \Lambda} x^2 G_2^c(x, 0)$$

definiert. Für die nicht reskalierte Theorie hat man entsprechend

$$\tilde{\mu}_2 := \sum_{x' \in \Lambda_L} x'^2 \tilde{G}_2^c(x', 0) = \sum_{x' \in \Lambda_L} x'^2 \langle \bar{\phi}(x') \bar{\phi}(0) \rangle_c \tilde{\cdot}$$

Da man jedes Feld  $\tilde{\phi} \in \mathcal{H}(\Lambda_L)$  durch den Skalierungsoperator aus einem Feld  $\phi \in \mathcal{H}(\Lambda)$  auf  $\Lambda$  erhalten kann und aufgrund der Definition des Maßes der reskalierten Theorie, gilt

$$\tilde{\mu}_2 := \sum_{x' \in \Lambda_L} x'^2 \langle \mathcal{S}_L \phi(x') \mathcal{S}_L \phi(0) \rangle_c' = \sum_{x \in \Lambda} (Lx)^2 \langle \phi(x) \phi(0) \rangle_c' = L^2 \sum_{x \in \Lambda} x^2 G_2'(x, 0) .$$

$\mu'_2$  ist wiederum definiert durch

$$\mu'_2 := \sum_{x \in \Lambda} x^2 G_2'(x, 0) ,$$

also gilt

$$\mu'_2 = L^2 \tilde{\mu}_2 .$$

In Anhang C wird die Skalenrelation von  $\tilde{\mu}_2$  hergeleitet.

Die Ergebnisse für  $\mu'_2$  sind

$$\mu'_2 = L^{-4+\eta} \left( \mu_2 + d \frac{L^2(L^2 - 1)}{6} \chi_2 - dL^2 \mu_2^{(L)} \right) \quad (4.14)$$

mit

$$\mu_2^{(L)} := \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1: m_1 \neq 0 \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \frac{\chi_2^{1PI} - 2\mu_2^{(L, m_1)1PI}}{1 - \tilde{v}\left(\frac{2\pi m_1}{L}, 0\right)(\chi_2^{1PI} - 2\mu_2^{(L, m_1)1PI})} \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi m_1}{L}} \quad (4.15)$$

und

$$\mu_2^{(L, m_1)1PI} := \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \sin^2\left(\frac{\pi}{L} m_1 x\right) R_2(x) . \quad (4.16)$$

$v(x) = 2\kappa$ , wenn  $x$  und 0 nächste Nachbarn sind, ist der Hopping-Propagator,  $\tilde{v}(k)$  die Fouriertransformierte

$$\tilde{v}(k) := \sum_{\nu=0}^{d-1} 2\kappa(e^{ik_\nu} + e^{-ik_\nu}) = \sum_{\nu=0}^{d-1} 4\kappa \cos k_\nu$$

$R_2$  ist schließlich die Fouriertransformierte der 1PI-Funktion. Es gilt:

$$\tilde{G}_2^c = \frac{\tilde{R}_2(k)}{1 - \tilde{v}(k)\tilde{R}_2(k)}$$

Man kann die Gleichung für  $\mu'_2$  auch folgendermaßen umformen:

$$\begin{aligned}\mu'_2 &= L^{-4+\eta} \mu_2 \left( 1 + d \frac{(L^2 - 1)}{6} \frac{\chi_2}{\mu_2} - d \frac{\mu_2^{(L)}}{\mu_2} \right) \\ &= L^{-4+\eta} \mu_2 \underbrace{\left( 1 + d \frac{m_r^2}{2d} \left[ \frac{(L^2 - 1)}{6} - \frac{\mu_2^{(L)}}{\chi_2} \right] \right)}_{=: \mathcal{S}} \\ &= L^{-4+\eta} \mu_2 \mathcal{S}\end{aligned}$$

Diese Form wird später in der numerischen Untersuchung benutzt.

## 4.5 Homomorphe Interpolation der RG-Transformation

Die RG-Transformation ist zunächst nur für ganzzahlige  $L \geq 2$  definiert. Für die numerische Behandlung ist es jedoch notwendig, auch Werte von  $L$  benutzen zu können, die nahe bei 1 liegen. Dazu werden die Skalenrelationen für die Suszeptibilitäten interpoliert [Por97]. Da es viele Möglichkeiten der Interpolation einer Funktion zwischen ihren ganzzahligen Stellen gibt, muß man weitere Eigenschaften fordern. Die Kombination von RG-Transformation gibt eine Funktionalgleichung für ganzzahlige  $L$  vor. Diese Funktionalgleichung soll auch für die Interpolation gelten. Mit Hilfe dieser Forderung wird die Interpolation bestimmt.

Die Skalenrelationen (4.12) und (4.14) definieren je einen Skalierungsoperator  $\mathcal{S}_L^{(i)} = \mathcal{S}_{L,\alpha}^{(i)}$  für jede betrachtete Suszeptibilität.

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_L^{(1)}(\chi_2) := \chi'_2 &= L^{-2+\eta} \chi_2 + \frac{1}{\alpha} \\ \mathcal{S}_L^{(4)}(\chi_4) := \chi'_4 &= L^{-d-4+2\eta} \chi_4 \\ \mathcal{S}_L^{(6)}(\chi_6) := \chi'_6 &= L^{-2d-6+3\eta} \chi_4 \\ \mathcal{S}_L^{(\mu_2)}(\mu_2) := \mu'_2 &= L^{-4+\eta} \left( \mu_2 + dL^2 \frac{L^2 - 1}{6} \chi_2 - dL^2 \mu_2^{(L)} \right)\end{aligned}$$

### 4.5.1 Interpolation für die ungewichteten Suszeptibilitäten

Die Interpolation soll die Halbgruppeneigenschaft der Skalenrelationen bzw. Renormierungsgruppenschritte haben. Aus der Skalenrelation von  $\chi_2$  ergibt sich

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{L_2, \alpha_2}^{(2)} \mathcal{S}_{L_1, \alpha_1}^{(2)}(\chi_2) &= \mathcal{S}_{L_2}^{(2)}(L_1^{-2+\eta} \chi_2 + \frac{1}{\alpha_1}) \\ &= (L_1 L_2)^{-2+\eta} \chi_2 + L_2^{-2+\eta} \frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2} \\ &\stackrel{!}{=} (L_1 L_2)^{-2+\eta} \chi_2 + \frac{1}{\alpha_{12}}.\end{aligned}$$

Für die Skalierungsoperatoren der ungewichteten Suszeptibilitäten gilt also

$$\mathcal{S}_{L_1, \alpha_1} \circ \mathcal{S}_{L_2, \alpha_2} = \mathcal{S}_{L_1 L_2, \alpha_{12}}$$

mit

$$\frac{1}{\alpha_{12}} = L_2^{-2+\eta} \frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}.$$

Dies fordert man für  $L_i \in [1, 2]$ . Für  $\mathcal{S}_L^{(4)}$  und  $\mathcal{S}_L^{(6)}$  ist die Forderung unabhängig von  $\alpha$  bereits erfüllt, wie man durch Inspektion sofort sieht.

Für  $\mathcal{S}_L^{(2)}$  muß der Parameter  $\alpha$ , der für  $\alpha \rightarrow \infty$  zu einem  $\delta$ -Blockspin führt,  $L$ -abhängig gemacht werden

$$\mathcal{S}_L^{(i)} := \mathcal{S}_{L, \alpha(L)}^{(i)}.$$

Dies beeinflußt die Gültigkeit der anderen Skalenrelationen für  $\chi_4, \chi_6$  nicht. Der Gleichung entnimmt man

$$L_2^{-2+\eta} \frac{1}{\alpha(L_1)} + \frac{1}{\alpha(L_2)} \stackrel{!}{=} \frac{1}{\alpha(L_1 L_2)}.$$

Um aus dieser Forderung die funktionale Form von  $\alpha(L)$  zu bestimmen, benötigt man weitere Informationen. Wir benötigen eine Interpolation zwischen  $L = 1$  und  $L = 2$ , der kleinsten natürlichen Zahl, die eine nichttriviale Skalenrelation ergibt. Für  $L = 2$  soll sich die gewöhnliche Skalenrelation ergeben, somit

$$\alpha(2) = \alpha.$$

$L = 1$  gehört zu einer Blockspin-Transformation, die das System unverändert läßt. Für die Suszeptibilitäten soll sich die Identität ergeben. Man benötigt im Hinblick auf die Skalenrelation für  $\chi_2$  daher

$$\alpha(1) = \infty.$$

Durch „raten“ findet man, daß

$$\alpha(L) := \alpha \frac{1 - 2^{-2+\eta}}{1 - L^{-2+\eta}}$$

diese Bedingungen erfüllt. Für Interpolationen von anderen Blockgrößen  $L_0$  ist  $\alpha(L)$  entsprechend zu wählen, d.h. man hat nur 2 durch die Blockgröße  $L_0$  zu ersetzen.

Für die ersten drei Skalierungsoperatoren mit  $L$ -abhängigem  $\alpha$  ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1^{(i)} &= \mathbb{I}, \\ \mathcal{S}_2^{(i)} &= \mathcal{S}_{2,\alpha}^{(i)} \text{ und} \\ \mathcal{S}_{L_1}^{(i)} \mathcal{S}_{L_2}^{(i)} &= \mathcal{S}_{L_1 L_2}^{(i)}, \end{aligned}$$

und damit ist der erste Teil des Problems gelöst.

### 4.5.2 Interpolation für $\mu_2$

Es bleibt der Skalierungsoperator für  $\mu_2$  zu untersuchen und entsprechend zu interpolieren. Die letzte Skalenrelation

$$\mathcal{S}_L^{(\mu_2)}(\mu_2) := \mu'_2 = L^{-4+\eta} \left( \mu_2 + d \frac{L^2 - 1}{6} \chi_2 - d \mu_2^{(L)} \right)$$

hat die Form

$$\mathcal{S}_L^{(\mu_2)}(\mu_2) = \mu'_2 = F_1(L)\mu_2 + F_2(L)\chi_2 + F_3(L),$$

mit drei Funktionen  $F_1, F_2$  und  $F_3$  abhängig von der Variablen  $L$ . Es muß nun untersucht werden, wie die Funktionen  $F_i : [1, 2] \rightarrow \mathbb{R}$  gewählt werden müssen, damit die Halbgruppeneigenschaft zusammen mit den Randwerten bei  $L = 1$  und  $L = 2$  erfüllt ist.

Die Forderungen für die Randwerte sind

$$\begin{aligned} F_1(1) &= 1 & F_2(1) &= 0 & F_3(1) &= 0 \\ F_1(2) &= 2^{-4+\eta} & F_2(2) &= 2^{-4+\eta} \frac{d}{6} (2^2 - 1) & F_3(2) &= -2^{-4+\eta} d \mu_2^{(2)}. \end{aligned}$$

Zweimalige Anwendung von  $\mathcal{S}_L^{(\mu_2)}$  ergibt

$$\begin{aligned} (\mathcal{S}_{L_2}^{(\mu_2)})(\mathcal{S}_{L_1}^{(\mu_2)})(\mu_2) &= F_1(L_2) \mathcal{S}_{L_1}^{(\mu_2)} \mu_2 + F_2(L_2) \mathcal{S}_{L_1}^{(2)} \chi_2 + F_3(L_2) \\ &= F_1(L_2) (F_1(L_1)\mu_2 + F_2(L_1)\chi_2 + F_3(L_1)) + F_2(L_2)\chi_2 + \\ &\quad F_2(L_2) \frac{1}{\alpha(L_1)} + F_3(L_2) \\ &= F_1(L_2) F_1(L_1) \mu_2 + (F_1(L_2) F_2(L_1) + F_2(L_2)) \chi_2 + \\ &\quad (F_1(L_2) F_3(L_1) + F_3(L_2) + F_2(L_2) \frac{1}{\alpha(L_1)}) \\ &\stackrel{!}{=} (\mathcal{S}_{L_2 L_1}^{(\mu_2)})(\mu_2) = F_1(L_2 L_1) \mu_2 + F_2(L_2 L_1) \chi_2 + F_3(L_2 L_1). \end{aligned}$$

### **Bestimmung von $F_1$**

Die Bedingung für  $F_1$  ist

$$F_1(L_1)F_2(L_2) = F_1(L_1L_2),$$

also eine Funktionalgleichung einer Potenzfunktion. Zusammen mit den Randwerten und der Form von  $\mu_2$  erhält man

$$F_1(L) = L^{-4+\eta}.$$

### **Bestimmung von $F_2$**

Die Forderung an  $F_2$  ist

$$F_1(L_2)F_2(L_1) + F_2(L_2) = F_2(L_2L_1).$$

Für  $F_2$  führt der Ansatz

$$F_2(L) = K_2 L^{-4+\eta} (L^2 - 1)$$

zum Ziel. Also eine Funktion der Form, wie sie in der Skalenrelation (4.14) für natürliche  $L$  schon vorkommt. Es gilt  $F_2(1) = 0$ , und man rechnet zunächst nach, daß die Forderung an  $F_2$  unabhängig vom Wert von  $K_2$  erfüllt ist.

$$\begin{aligned} F_2(L_1)F_1(L_2) + F_2(L_2)L_1^{-2+\eta} \\ &= K_2((L_1L_2)^{-4+\eta}(L_1^2 - 1) + (L_1L_2)^{-4+\eta}(L_2^2 - 1)L_1^2) \\ &= K_2(L_1L_2)^{-4+\eta}((L_1L_2)^2 - 1) = F_2(L_1L_2) \end{aligned}$$

$K_2$  wird durch den Randwert für  $L = 2$  bestimmt und ergibt wie erwartet den entsprechenden Vorfaktor aus der Skalenrelation (4.14):

$$F_2(2) = K_2 2^{-4+\eta} (2^2 - 1) \stackrel{!}{=} 2^{-4+\eta} d \frac{2^2 - 1}{6} \Rightarrow K_2 = \frac{d}{6}$$

### **Bestimmung von $F_3$**

Die Forderung an  $F_3$  ist

$$F_1(L_2)F_3(L_1) + F_3(L_2) + F_2(L_2) \frac{1}{\alpha(L_1)} = F_3(L_2L_1).$$

Indem man zunächst

$$F_3(L) = -K_3 L^{-4+\eta}$$

wie in der Skalenrelation (4.14) vorgegeben ausprobiert, und die dabei auftretenden „Fehlerterme“ berechnet, wird man auf den Ansatz

$$F_3(L) = K_3(1 - L^{-4+\eta}) + \frac{K_2}{\alpha(L)}$$

geführt. Die drei Terme auf der linken Seite der Forderung an  $F_3$  sind

$$\begin{aligned} F_1(L_2)F_3(L_1) &= K_3(1 - L_1^{-4+\eta})L_2^{-4+\eta} + \frac{K_2}{\alpha(L_1)}L_2^{-4+\eta} \\ F_3(L_2) &= K_3(1 - L_2^{-4+\eta}) + \frac{K_2}{\alpha(L_2)} \\ F_2(L_2)\frac{1}{\alpha(L_1)} &= K_2(L_2^2 - 1)L_2^{-4+\eta}\frac{1}{\alpha(L_1)}. \end{aligned}$$

Durch Addition der drei Terme erhält man

$$K_3[1 - (L_1L_2)^{-4+\eta}] + K_2\left[\frac{1}{\alpha(L_2)} + \frac{L_2^{-2+\eta}}{\alpha(L_1)}\right].$$

Berücksichtigt man nun noch die Funktionalgleichung von  $\alpha(L)$

$$L_2^{-2+\eta}\frac{1}{\alpha(L_1)} + \frac{1}{\alpha(L_2)} = \frac{1}{\alpha(L_1L_2)},$$

so sieht man, daß die Funktionalgleichung von  $F_3$  mit diesem Ansatz erfüllt ist.

Es bleibt  $K_3$  zu durch den Randwert bei  $L = 2$  zu bestimmen.

$$\begin{aligned} F_3(2) &= K_3(1 - 2^{-4+\eta}) + \frac{K_2}{\alpha} \stackrel{!}{=} -2^{-4+\eta}d\mu_2^{(2)} \\ \Rightarrow K_3 &= -\frac{2^{-4+\eta}d\mu_2^{(2)} + \frac{d}{6\alpha}}{1 - 2^{-4+\eta}} \end{aligned}$$

Mit diesen Funktionen kann man nun noch die Skalenrelation von  $\mu_2$  in die folgende kompakte Form bringen

$$\mu'_2 = F_1(L)\mu_2 \underbrace{\left(1 + \frac{F_2(L)}{F_1(L)}\frac{\chi_2}{\mu_2} + \frac{F_3(L)}{F_1(L)}\frac{1}{\mu_2}\right)}_{\mathcal{S}}$$

und erhält so die Interpolation des Skalenfaktors  $\mathcal{S}$ , der später für die Berechnung der renormierten Kopplungen während für die numerische Behandlung des Problems benötigt wird.

## 4.6 Skalenrelationen der renormierten Kopplungen

Die Skalenrelation der renormierten Kopplungen  $m_r, Z_r, g_r, h_r$  folgen aus denen der Suszeptibilitäten. Sie werden in Anhang C hergeleitet. Hier sind insbesondere die renormierte Masse  $m_r$  und die renormierte Kopplung  $g_r$  wichtig. Für diese gilt

$$\begin{aligned}\frac{m_r'^2}{2d} &= \frac{m_r^2 L^{4-\eta}}{2d} \frac{L^{-2+\eta} + \left(\frac{1}{\chi_2^{1PI}} - 2\kappa 2d\right) \alpha^{-1}}{\mathcal{S}} \\ -\frac{g_r'}{(2d)^2} &= \frac{\chi_4'}{(\mu_2')^2} = -\frac{g_r}{(2d)^2} L^{4-d} \mathcal{S}^{-2}.\end{aligned}$$

### 4.6.1 Fluß der nackten Kopplungen

Nun sind also alle Gleichungen bekannt, um einerseits mit Hilfe der LCE aus den Kopplungen  $\kappa, \lambda, \dots$  die Suszeptibilitäten  $\chi_n(\kappa, \lambda, \dots)$  berechnen können und andererseits die RG-Transformierten  $\chi'_n$  der Suszeptibilitäten und der renormierten Kopplungen zu berechnen.

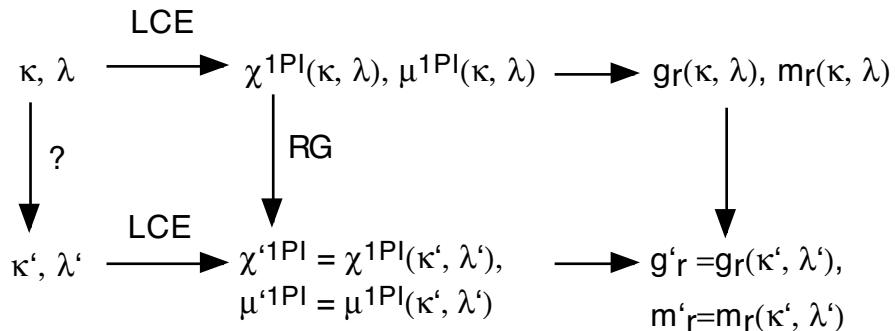


Abb. 4.3: Berechnung des RG-Flusses

Aus diesen Daten kann man die unbekannte RG-Transformation der nackten Kopplungen auf der linken Seite von Abbildung 4.3 mit Hilfe des Ansatzes

$$\chi'_n \stackrel{!}{=} \chi_n(\kappa', \lambda', \dots)$$

und

$$\mu'_2 \stackrel{!}{=} \mu_2(\kappa', \lambda', \dots)$$

oder auch

$$m'_r \stackrel{!}{=} m_r(\kappa', \lambda', \dots)$$

und

$$g'_r \stackrel{!}{=} g_r(\kappa', \lambda', \dots)$$

berechnen. Die Anzahl zu benutzender Gleichung ist durch die Anzahl der nackten Kopplungen bestimmt.

Mit anderen Worten: In der unteren Zeile von Abbildung 4.3 kennt man die rechte Seite, also die Suszeptibilitäten bzw. renormierten Kopplungen nach einem RG-Schritt. Durch Inversion der unteren Zeile der Abbildung 4.3 bestimmt man die zugehörigen nackten Kopplungen nach einem RG-Schritt. Damit hat man die linke Seite berechnet. Man bestimmt also die Theorie der ursprünglichen Form mit neuen Kopplungen  $\kappa', \lambda', \dots$ , so daß die Skalenrelationen der Suszeptibilitäten bzw. renormierten Kopplungen erfüllt sind. Da bei einem RG-Schritt typischerweise eine komplexere Theorie entsteht, die mehr nackte Kopplungen hat, als die ursprüngliche, ist dies nicht exakt, sondern nur näherungsweise möglich. Da die LCE nur bis zu einer endlichen Ordnung berechnet wird, ist dies eine weitere Approximation bei diesem Verfahren. Die Inversion wird ferner numerisch durchgeführt. Das Vorgehen wird im nächsten Kapitel besprochen.

Man benutzt zur Inversion zweckmäßigerweise Größen, die in der Nähe der kritischen Linie regulär bleiben. Wir benutzen hier die renormierten Kopplungen  $m_r$  und  $g_r$ , um den Fluß der beiden nackten Kopplungen  $\kappa$  und  $\lambda$  zu bestimmen. Für den Fluß der drei Kopplungen  $\kappa, \lambda$  und der  $\phi^6$ -Kopplung  $\sigma$  wird noch die renormierte  $\phi^6$ -Kopplung  $h_r$  hinzugenommen.



# KAPITEL 5

---

## Erzeugung und Auswertung der Flußdaten

---

In diesem Kapitel werden die numerischen Methoden beschrieben, mit denen die Flußdaten und daraus abgeleitete kritische Größen berechnet werden. Ferner werden verschiedene Fehlerquellen analysiert und untersucht, welche Faktoren zur Genauigkeit der numerischen Resultate beitragen. Daraus lassen sich mögliche Maßnahmen ableiten, mit denen die Genauigkeit der Methode verbessert werden könnte. Die Ergebnisse werden mit Resultaten verglichen, die mit anderen Methoden gewonnenen wurden.

Betrachtet man die Berechnung kritischer Exponenten, so ist das in dieser Arbeit untersuchte Verfahren eine Ergänzung zu bereits untersuchten Verfahren [BS79, SB81, FL91, Swe79b]. Es zeigte sich bei der Untersuchung, daß man in der vorliegenden Form nicht an die Genauigkeit moderner Monte-Carlo-Verfahren [HPV98, Has99, BFMMS98] herankommt. Auch Reihenentwicklungen zusammen mit Extrapolationsmethoden erreichen eine höhere Genauigkeit [GZJ98].

Die Berechnung von Renormierungsgruppenflüssen gehört dagegen zu den Stärken der Methode.

### 5.1 Die Situation und Ziele der Untersuchung

In diesem ersten Abschnitt wird zunächst die Situation vorgestellt, wie sie sich nach den numerischen Untersuchungen ergeben hat. In Abbildung 5.1 wird die Situation graphisch angedeutet.

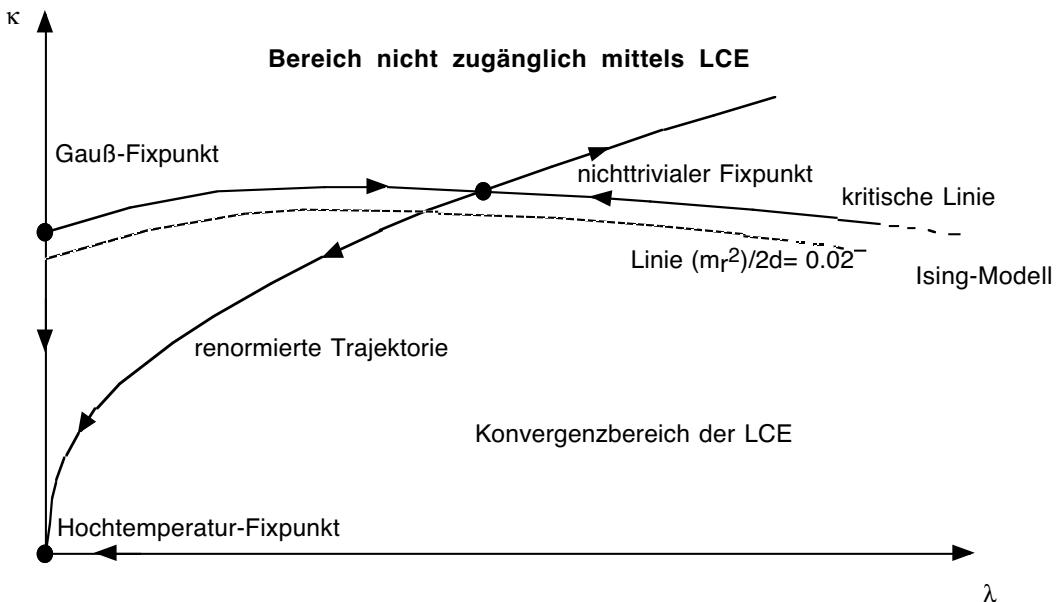


Abb. 5.1: Situation bei der numerischen Untersuchung

Die Ziele der Untersuchung sind

1. Lokalisierung des Fixpunktes
2. Bestimmung der renormierten Trajektorie in der Nähe des nichttrivialen Fixpunktes
3. Berechnung kritischer Exponenten

Besonders interessant ist der Bereich um den nichttrivialen Fixpunkt. In der Umgebung des Fixpunktes treten jedoch mehrere Schwierigkeiten auf.

1. Eine technische Schwierigkeit ist, daß der Konvergenzbereich der LCE an der kritischen Linie endet. Da nur eine endliche Reihe zur Verfügung steht, kann man jedoch nicht bis an die kritische Linie heran, sondern nur auf einen gewissen Abstand. Der Abstand wird durch die renormierte Masse parametrisiert.
2. Der nichttriviale Fixpunkt wird nicht nur durch zwei Kopplungen beschrieben, sondern durch unendlich viele. In Bereich des nichttrivialen Fixpunktes ist der Fluß zweier Kopplungen daher eine schlechtere Approximation als im Bereich des Hochtemperatur-Fixpunktes ( $\kappa = 0, \lambda = 0$ ) oder des Gauß-Fixpunktes ( $\kappa = \kappa_G, \lambda = 0$ ).

3. Die renormierte Trajektorie hat einen kleinen Winkel zur kritischen Linie und man muß erwarten, daß die Krümmung der RG-Trajektorien nahe der kritischen Linie durch die Approximation nicht zuverlässig reproduziert wird. Dies erschwert die Lokalisierung des Fixpunktes. Ferner ist entlang der renormierten Trajektorie der Abstand vom Fixpunkt deutlich größer, als die LCE dies zulassen würde.
4. Durch die Verwendung einer linearen RG-Transformation muß der freie Parameter  $\beta$  bzw.  $\eta$  angepaßt werden. Dafür wurde auf numerisch berechnete Werte anderer Autoren zurückgegriffen.

## 5.2 Implementation und Konsistenztests

Als Grundlage der numerischen Untersuchung dienen Programme zur Berechnung der LCE der 1PI-Suszeptibilitäten, die von Reisz geschrieben wurden. Auf diese Programme wurden verschiedene C- und Perl-Programme aufgesetzt, um RG-Flüsse zu berechnen und die interessierenden Daten zu extrahieren. Details zur Implementierung und die Dokumentationen der Programme sind in Anhang D zusammengestellt.

Die Implementation wurde mit verschiedenen Tests auf Konsistenz überprüft. Die Tests bauen hierarchisch aufeinander auf: Die unterste Lage bezieht sich auf die Verlässlichkeit der LCE, die nächste auf den Nullstellenalgorithmus, mit dem die Skalenrelation invertiert wird. Im dritten Schritt wird die Verletzung der Halbgruppen-eigenschaft der RG getestet.

### 5.2.1 Abstand von der kritischen Linie

Die LCE liefert gute Ergebnisse, wenn die Clustergröße größer als die Korrelationslänge ist. Eine naive Abschätzung für die Clustergröße in Einheiten der Gitterkonstanten ist die Ordnung der Entwicklung. Dies ist aber nur eine obere Abschätzung, da die Cluster typischerweise nicht kettenförmig sind. Die typische Clustergröße ist kleiner.

Für  $N = 1$  lag die Entwicklung bis zu 20. Ordnung vor. Man kann daher als obere Abschätzung für die Korrelationslänge  $\xi$  bzw. als untere Abschätzung für die Masse  $m_r$  annehmen, daß die LCE bis etwa

$$\xi = \frac{1}{m_r} \approx 20$$

gute Resultate liefert.

Aufgrund dieser Überlegungen ist es möglich, die renormierte Masse als Indikator für ausreichenden Abstand von der kritischen Linie zu verwenden. Man muß dann beachten, daß

$$m_r > \frac{1}{20}$$

gilt. In den verwendeten Programmen wurde die Größe  $\frac{m_r^2}{2d}$  berechnet. Für diese Größe hat man daher eine theoretische Grenze von

$$\frac{m_r^2}{2d} > \frac{1}{6 \cdot 400} \approx 0.0004 \text{ bzw. } m_r^2 > \frac{1}{400} = 0.0025.$$

Es zeigte sich bei der Untersuchung, daß bereits deutlich oberhalb dieser Masse die RG-Flüsse erratisches Verhalten zeigen.  $\frac{m_r^2}{2d}$  blieb bei den Untersuchungen größer als 0.016.  $m_r^2$  ist also einen Faktor 40 größer und  $m_r^2$  einen Faktor 6 größer, als die naive Abschätzung angibt. Dies entspricht etwa der Koordinationszahl des Gitters und es ist plausibel, daß sich die effektive Clustergröße um diesen Faktor reduziert.

Weiterhin ist ein Vergleich mit den von Lüscher und Weisz gefundenen Werten interessant [LW87]. Die Entwicklung wird von ihnen in vier Dimensionen bis zur 10. Ordnung berechnet und sie finden eine zuverlässige Abschätzung des Fehlers bis  $\kappa \leq 0.95\kappa^*$ . Rechnet man nur bis zur 10. Ordnung, so erhält man die naive Abschätzung

$$\frac{m_r^2}{2d} > \frac{1}{8 \cdot 100} \approx 0.0013 \text{ bzw. } m_r > \frac{1}{100} = 0.1.$$

$0.95\kappa^*$  entspricht  $m_r \approx 0.5$ , also einer Korrelationslänge von 2. Dies deckt sich gut mit dem empirisch gefundenen Faktor 6 gegenüber der einfachen theoretischen Abschätzung  $\xi \approx \text{Ordnung}(\kappa)$ .

Nach diesen Abschätzungen wird die LCE während der Untersuchungen in dem Bereich benutzt, in dem sie zuverlässige Resultate liefert.

### 5.2.2 Genauigkeit der Inversion

Eine weitere Frage ist, wie genau  $\kappa'$ ,  $\lambda'$  berechnet werden und wie genau die LCE mit diesen Parametern die vorgegebenen Suszeptibilitäten reproduziert.

Der zentrale Schritt der Flußprogramme besteht darin, daß die Routine `broydn()` der Numerical Recipes [PTVF92] eine Nullstelle der Funktion `srViolation()` sucht (Anhang D). Es gibt zwei Versionen der Flußprogramme. In der zuerst verwendeten Programmversion, erhält `srViolation()` als Parameter den Wert von  $\lambda$  und berechnet zunächst durch

$$\frac{{m'}_r^2}{2d} - \frac{{m'}_r^2}{2d}(\kappa', \lambda) \stackrel{!}{=} 0$$

den Wert von  $\kappa$  und gibt dann an den Algorithmus `broydn` für die Nullstellensuche die Funktion

$$w_g \left( \frac{g'_r}{(2d)^2} - \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa', \lambda') \right)$$

zurück. Die Genauigkeit dieser Berechnungen wird von zwei Paramtern kontrolliert. Dies ist `MR_REL_EPSILON` für die erster Gleichung und `TOLF` für `broydn`. In einer zweiten - der später verwendeten Version - berechnet `srViolation` aus den Parametern  $\kappa$  und  $\lambda$  die Funktion

$$\begin{pmatrix} w_m \left( \frac{m'^2_r}{2d} - \frac{m'^2_r}{2d}(\kappa', \lambda') \right) \\ w_g \left( \frac{g'_r}{(2d)^2} - \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa', \lambda') \right) \end{pmatrix}.$$

`broydn` sucht nun eine gemeinsame Nullstelle dieses nichtlinearen Funktionensystems. Der Parameter `TOLF` kontrolliert nun die Genauigkeit beider nackter Kopplungen. Der Parameter `MR_REL_EPSILON` wird nur noch für die erste Bestimmung von  $\kappa$  aus dem vorgegebenen  $m_r^2/2d$  benötigt. In der Nähe des nichttrivialen Fixpunktes konvergierte die erste Version des Flußverfolgungsprogrammes nicht. Dies war der Grund, das Flußprogramm auf die zweite Methode umzustellen, obwohl diese für eine Blocklänge von 2 eine singuläre Jacobimatrix findet. Weiter vom Fixpunkt entfernt sind die Ergebnisse beider Programme gleich.

Die beiden Konstanten  $w_m$  und  $w_g$  dienen der Steuerung der Größenordnung der Funktionen. `broydn` funktioniert am besten, wenn die Funktionen die Größenordnung 1 haben. Es wurde wegen der typischen Werte von  $m_r^2/2d \approx 0.04$  mit  $w_m = 100$  gerechnet. Typische Werte von  $g_r/(2d)^2$  in der Nähe des Fixpunktes liegen etwa bei 0.3. Als Gewicht für die zweite Gleichung wurde daher  $w_g = 10$  verwendet.

Nach der Bestimmung der nackten Kopplungen  $\kappa', \lambda'$  wurde die Summe

$$sr\_v := \frac{1}{w_m + w_g} \left( w_m \left| \frac{m'^2_r}{2d} - \frac{m'^2_r}{2d}(\kappa', \lambda') \right| + w_g \left| \frac{g'_r}{(2d)^2} - \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa', \lambda') \right| \right)$$

berechnet, die ein Maß für die Verletzung der Skalenrelationen ist. Die beobachteten Werte von `sr_v` waren relativ unabhängig von der Blockgröße, die im Bereich  $L = 1.1$  bis  $L = 1.0001$  untersucht wurde. `sr_v` variierte dabei im Bereich  $10^{-9}$  bis  $10^{-11}$ . Die Invertierungsroutine bestimmt also tatsächlich  $\kappa'$  und  $\lambda'$  so genau, daß die beiden Gleichungen

$$\frac{m'^2_r}{2d} = \frac{m_r^2}{2d}(\kappa', \lambda')$$

und

$$\frac{g'_r}{(2d)^2} = \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa', \lambda')$$

mit der eingestellten Genauigkeit `TOLF`=  $10^{-8}$  erfüllt sind.

### 5.2.3 Kombination von RG-Schritten

Die Skalenrelationen der renormierten Kopplungen werden so interpoliert, daß sie die Halbgruppeneigenschaft

$$\mathcal{R}_L \circ \mathcal{R}_{L'} = \mathcal{R}_{LL'}$$

der RG-Transformation haben. Als weiterer Konsistenztest wurde überprüft, ob die Programme diese Eigenschaft auch zeigen und wie groß die Genauigkeit der Kombination von RG-Schritten ist.

Um einen Überblick über die Verletzung der Halbgruppeneigenschaft pro RG-Schritt zu bekommen, wurde von einem vorgegebenen Startwert die RG-Transformation mit  $L = 1.01$  ausgeführt. Vom gleichen Start ausgehend, wurden 2 RG-Transformationen mit  $L = \sqrt{1.01}$  und 10 RG-Transformationen mit  $L = \sqrt[10]{1.01}$  berechnet und die Endergebnisse verglichen. Dieser Test wurde für andere Werte von  $L$  wiederholt. In Anhang E werden noch Daten für  $L = 1.1$  und  $L = 1.001$  gezeigt. Die Tabellen enthalten Daten für den Fluß, der bei  $\kappa = 0.178436$ ,  $\lambda = 1.0$ ,  $m_r^2 = 0.03$  startet. Es zeigte sich, daß der relative Fehler von  $\lambda$  der größte relative Fehler ist, der auftritt. Die relativen Fehler von  $m_r^2$  sind etwas kleiner, aber von der gleichen Größenordnung wie die von  $\lambda$ , während die von  $\kappa$  etwa eine Größenordnung kleiner sind.

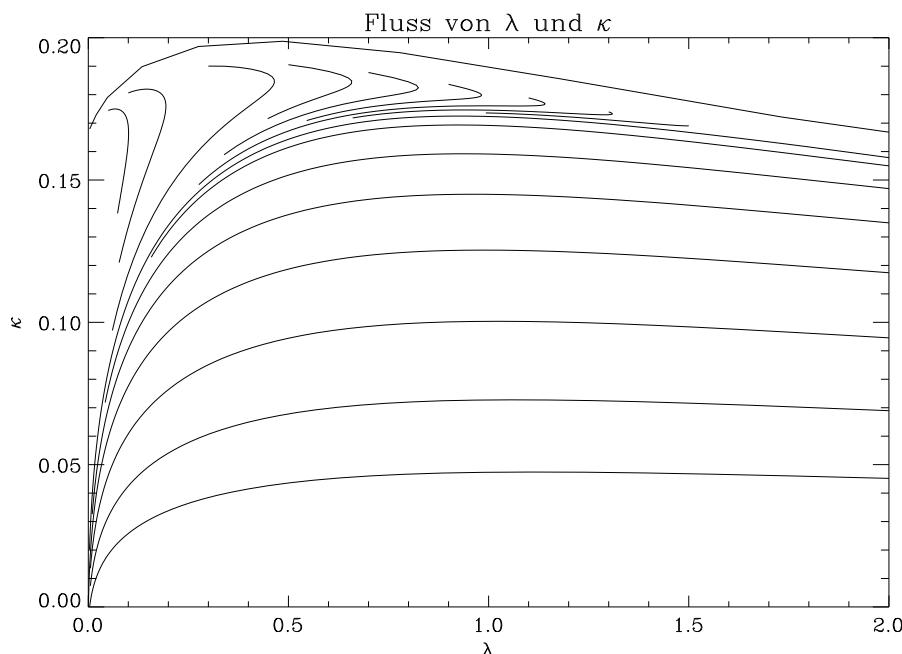
Die relativen Fehler wurden an verschiedenen Stellen des Flusses untersucht. Hier werden die Daten in der Nähe des Austrittspunktes der renormierten Trajektorie aus der „verbotenen Zone“ gezeigt, weil sie für die weitere Untersuchung am interessantesten sind. Die relativen Fehler, die dabei auftraten, sind aber auch für Flußdaten an anderen Stellen typisch.

Diese Untersuchung liefert ferner eine Abschätzung dafür, wie hoch die numerische Genauigkeit bei der Bestimmung von  $\kappa'$  und  $\lambda'$  ist. Wie man den Tabellen E.1, E.3 und E.4 entnimmt, ist die Genauigkeit von der Blockgröße abhängig. Er nimmt mit der Blockgröße ab. Legt man die maximalen relativen Fehler zugrunde, die in den in den Tabellen berechneten Fällen bei der Bestimmung von  $\lambda$  auftreten, so findet man für  $L = 1.01$  einen relativen Fehler von  $10^{-6}$ , für  $L = 1.1$  von  $10^{-4}$  und bei  $L = 1.001$  von  $5 \cdot 10^{-7}$ .

### 5.2.4 Qualitatives Verhalten der Flußlinien

Ein weiterer Test auf Konsistenz ist das erwartete qualitative Verhalten von Flußlinien. Man erwartet, daß Flußlinien sich nicht überkreuzen und daß sie in der Hochtemperaturphase zum Hochtemperatur-Fixpunkt laufen. Dies konnte verifiziert werden.

Ferner erwartet man, daß die Flußlinien von der kritischen Linie weggekrümmt sind. Die Lage der kritischen Linie ist aus [Rei95b] bekannt und wird auch in [Has99]

Abb. 5.2: RG-Fluß ( $N = 1$ )

angegeben. Die Flußlinien haben diese Linie nicht geschnitten und sie sind wie erwartet von dieser Linie weggekrümmt.

### 5.3 Flußbilder

Nach den grundlegenden Tests auf Konsistenz des Verfahrens wurden Flußbilder im Bereich von großen renormierten Massen bis hin zu  $m_r^2/(2d) = 0.02$  berechnet (Abb. 5.2, 5.3). Bis zum Wert  $m_r^2/(2d) = 0.016$  konvergierte zumindest das Verfahren. Oberhalb dieses Wertes kehrte sich die Flußrichtung um. Man stößt hier an die Grenze der Konvergenz der LCE, so daß man nicht mehr erwarten kann, daß die LCE gute Ergebnisse für die physikalischen Größen liefert. Bis zu welcher Grenze man sie verwenden kann, wird in einem späteren Abschnitt untersucht.

### 5.4 Weitere systematische Fehler

Man erwartet eine gute Übereinstimmung des tatsächlichen RG-Flusses mit der zweidimensionalen Approximation bei kleinen  $\lambda$  oder großen renormierten Massen  $m_r$ . In diesem Bereich wird der Fluß von den beiden trivalen Fixpunkten, dem

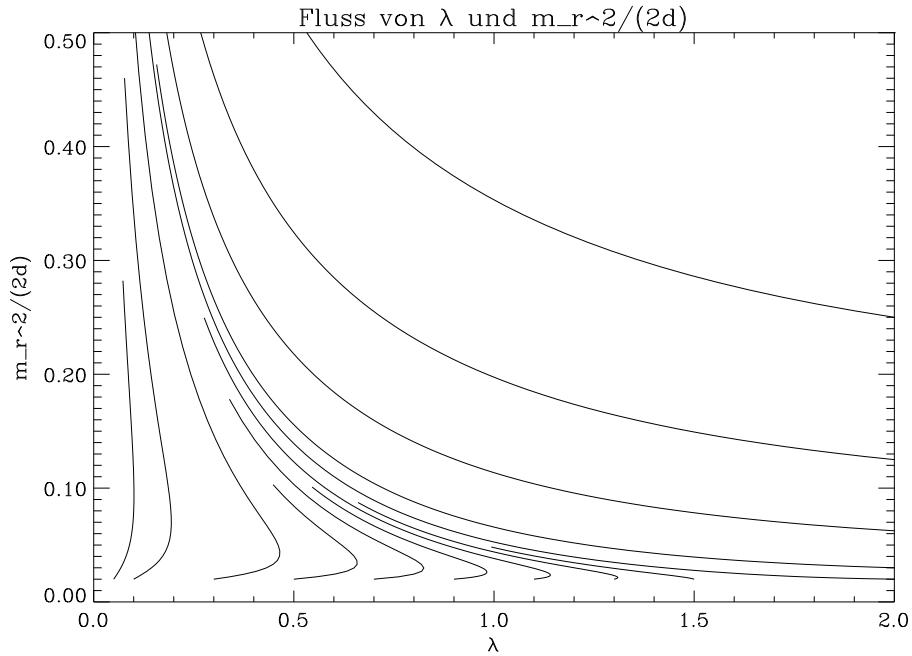


Abb. 5.3: RG-Fluß ( $N = 1$ )

Gaußschen Fixpunkt ( $\kappa = \kappa_{Gauß}, \lambda = 0$ ) und dem Hochtemperatur-Fixpunkt ( $\kappa = 0, \lambda = 0$ ) dominiert. Der nichtriviale Fixpunktes ist dagegen nicht nur durch zwei Parameter, sondern durch unendlich viele Parameter, definiert. Zudem liegt er auf der Grenze des Konvergenzbereiches der LCE.

Um den Effekt der endlichen LCE zu untersuchen, wurde die Ordnung der Entwicklung verändert. Dabei ging es um die Frage, wie sich qualitativ und quantitativ die Flüsse bei Änderung der Ordnung verändern und ab welcher Masse man quantitativ genaue Ergebnisse erzielt. Dies ist eine andere Frage als die, bis wohin die LCE gute Ergebnisse liefert. Denn es geht bei dieser Frage darum, bis zu welchen Werten von  $m_r^2/(2d)$  die Inversion der LCE verlässliche Resultate liefert. Ein einfaches Beispiel für eine solche Situation ist eine Funktion, die nur schwach von den Argumenten abhängt. Die Berechnung des Funktionswertes aus dem Argument kann dann sehr genau, aber die Bestimmung des Argumentes zu einem gegebenen Funktionenwert mit einer größeren numerischen Unsicherheit verbunden sein.

Für die Untersuchung der qualitativen Form der Fehler wurde in der Nähe des vermuteten Austrittspunktes der renormierten Trajektorie das Flußbild mit Reihen zur 20. Ordnung berechnet. Dann wurde es mit den Flußlinien überlagert, die mit Reihen der Ordnungen 10, 12, 14, 16, 18 berechnet wurden Abb. 5.4. Das zweite Bild 5.5 zeigt das Flußbild von  $\lambda$  und  $m_r^2/(2d)$ , an dem man die zugehörigen Massen ablesen kann.

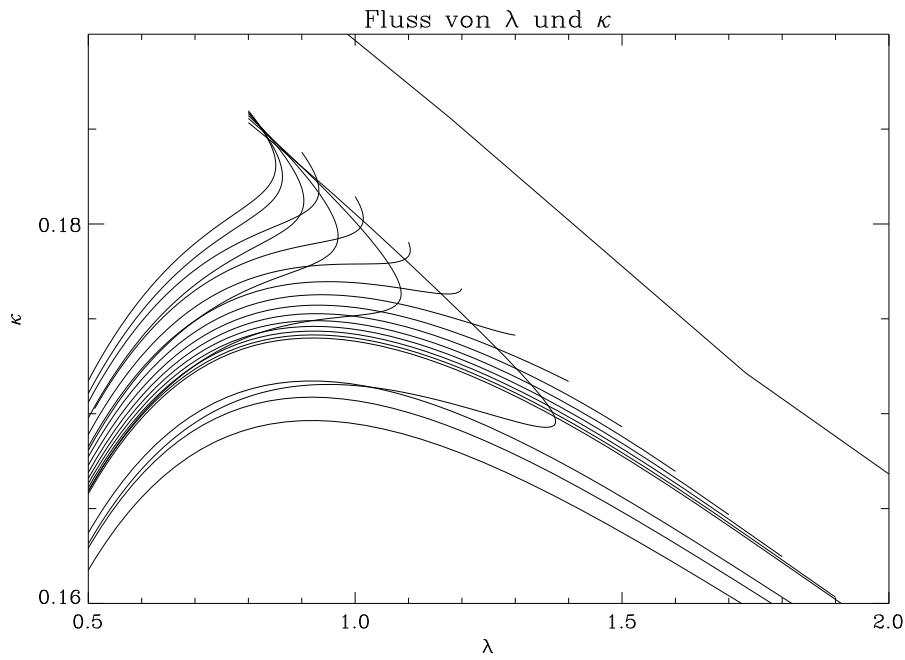


Abb. 5.4: RG-Fluß ( $N = 1$ ),  $L = 20$ , überlagert mit  $L = 10, 12, 14, 16, 18$ .

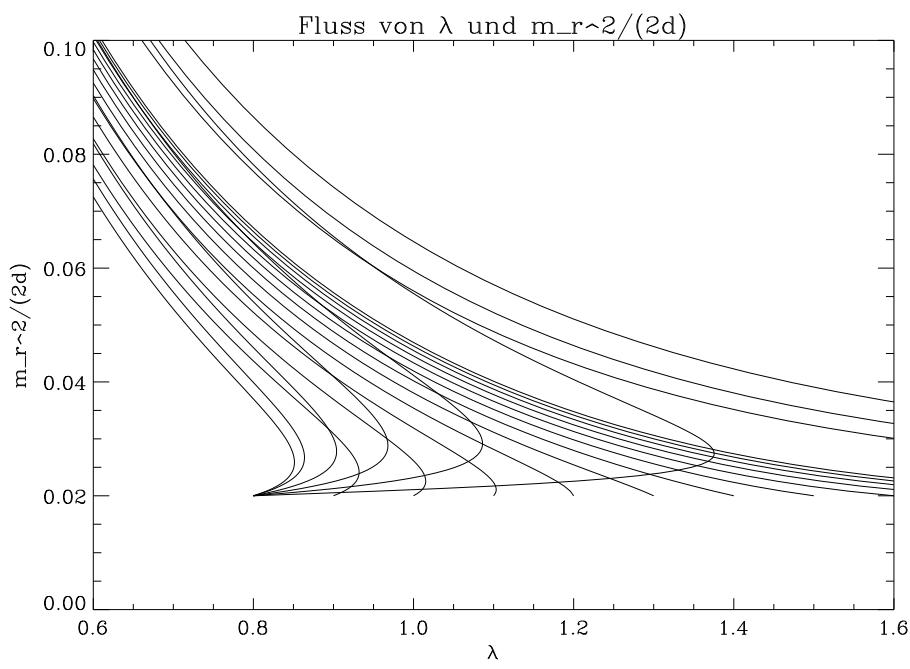


Abb. 5.5: RG-Fluß ( $N = 1$ ),  $L = 20$ , überlagert mit  $L = 10, 12, 14, 16, 18$ .

Die Flußrichtung auf der Abbildung 5.4 ist nach unten-links. Als Ergebnis läßt sich feststellen, daß die Flüsse bei kleineren Ordnungen gegenüber den Flüssen höherer Ordnungen bei kleinen renormierten Massen zunächst zu lange zu größeren  $\lambda$  verlaufen. Durch diesen Fehler überschätzt man den Wert der Fixpunktkoordinate  $\lambda^*$ . Wenn man sich auf der renormierten Trajektorie befindet, so hat der berechnete Fluß bei kleinen Massen die Tendenz, nach links abzuweichen, bevor er sich bei größeren Massen wieder dem „tatsächlichen“ Verlauf des Flusses anpaßt. Man würde also diese Trajektorie für eine Trajektorie halten, die sich links vom Fixpunkt befindet.

Wie man Abb. 5.4 und 5.5 entnimmt, wird der Fehler mit abnehmender Ordnung größer und verschwindet erst bei größeren Massen. Seine qualitative Form hängt jedoch nicht von der Ordnung ab. Es ist daher anzunehmen, daß auch der Fehler für die maximal verwendete Ordnung 20 von dieser Gestalt ist. Man überschätzt also den Wert der Fixpunktkoordinate  $\lambda^*$ , wenn man zu kleinen Massen benutzt.

Um den Fehler auch quantitativ zu untersuchen, wurde bei einem vorgegebenen Wert von  $\lambda$  für die Reihe 19. und 20. Ordnung bei verschiedenen Massen startend der Fluß berechnet. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 5.6 und 5.7 dargestellt. Man stellt fest, daß erwartungsgemäß bei größeren Startmassen die Flüsse sich mehr und mehr angleichen. Für  $m_r^2/(2d) = 0.04$  gibt es bereits eine gute Übereinstimmung. Man kann erwarten, daß die Reihe bis zur 20. Ordnung noch bei etwas kleineren Massen korrekte Ergebnisse liefert.

Im Anhang E sind in den Tabellen E.7, E.8, E.9 und E.10 Vergleiche von Ergebnissen berechnet mit der LCE zu 18., 19. und 20. Ordnung bei verschiedenen renormierten Massen zusammengestellt. Dies erlaubt eine Abschätzung der Ungenauigkeit. Der Unterschied zwischen 19. Ordnung und 20. Ordnung ist größer als der zwischen 18. Ordnung und 20. Ordnung. Der größte relative Fehler tritt bei der Bestimmung von  $\lambda$  auf. Er beträgt für  $m_r^2/(2d) = 0.03$  zwischen 19. und 20. Ordnung etwa 0.2% und zwischen 18. und 20. Ordnung 0.12%. Bei  $m_r^2 = 0.06$  betragen die relativen Fehler 0.04% bzw. 0.03%. Von allen bisher betrachteten Fehlern sind dies die größten. Die endliche Ordnung ist der begrenzende Faktor bei der Bestimmung der Flüsse und damit der kritischen Größen.

## 5.5 Lokalisierung des Fixpunktes

Mit Hilfe der Flußbilder kann man den Fixpunkt grob lokalisieren, indem man die Trajektorie sucht, die im Bereich von  $m_r^2/(2d) = 0.04$  etwa linear verläuft. Diese wurde im Flußbild  $m_r^2/(2d)$  gegen  $\lambda$  dadurch festgelegt, daß auf der Linie  $m_r^2/(2d) = 0.04$  das Krümmungsverhalten der Kurven untersucht wurde und die Trajektorie gewählt wurde, bei der die Krümmung von rechts- auf linksgekrümmt wechselt. Diesen Bereich der Kurve wurde dann nach  $m_r^2/(2d) = 0$  extrapoliert.

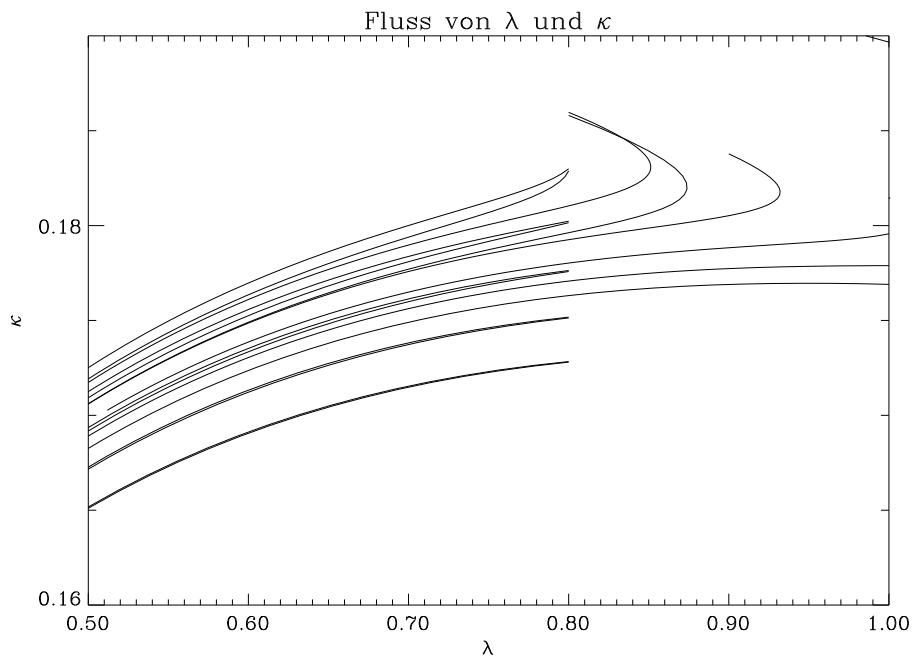


Abb. 5.6: RG-Fluß ( $N = 1$ ),  $L = 20, 19$   $m_r^2/2d = 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06$  im Vergleich.

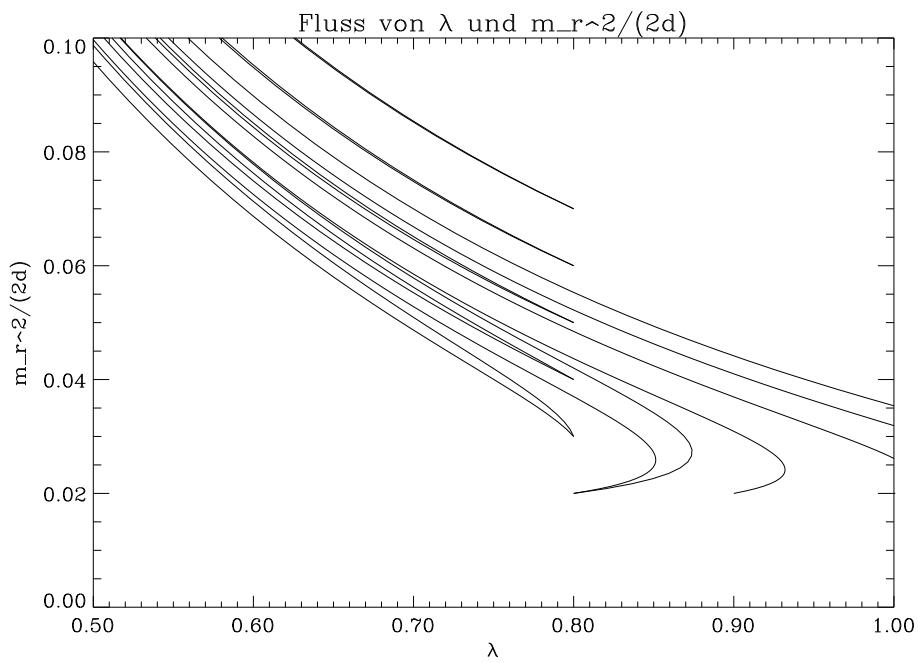


Abb. 5.7: RG-Fluß ( $N = 1$ ),  $L = 20, 19$   $m_r^2/2d = 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06$  im Vergleich.

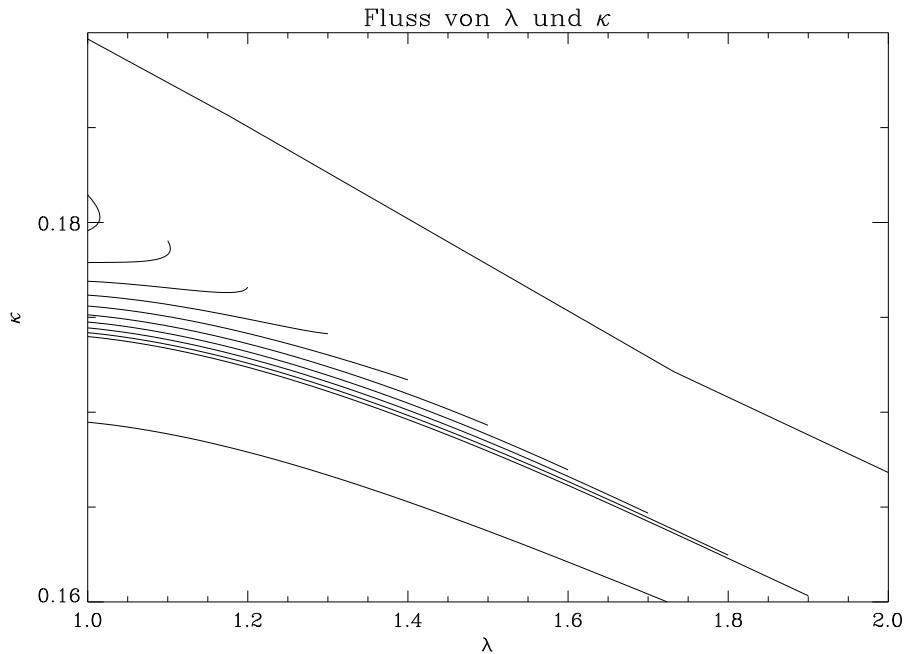


Abb. 5.8: RG-Fluß an der Austrittsstelle der renormierten Trajektorie aus der „verbotenen Zone“ ( $N = 1, 20$ . Ordnung)

Der Schnittpunkt liefert einen Schätzwert für den Fixpunkt. Mit diesem Verfahren ergibt sich  $\lambda^* = 1.0(2)$ . Die Unsicherheit kommt vor allem dadurch zustande, daß bedingt durch den Abstand vom kritischen Punkt die Trajektorien gekrümmmt sind. Die Auswahl des Kandidaten für die renormierte Trajektorie ist also mit einer großen Unsicherheit behaftet.

In den folgenden Abschnitten wird versucht, durch numerische Lösungen, eine höhere Genauigkeit zu erreichen. Die Unsicherheit, ob das Krümmungsverhalten der RG-Trajektorien auf die Approximation zurückzuführen ist, und der nötige Abstand von der kritischen Linie sind die Hauptprobleme bei dieser Untersuchung (Vgl. Abb. 5.8 vs 5.9 und 5.10 vs 5.11.).

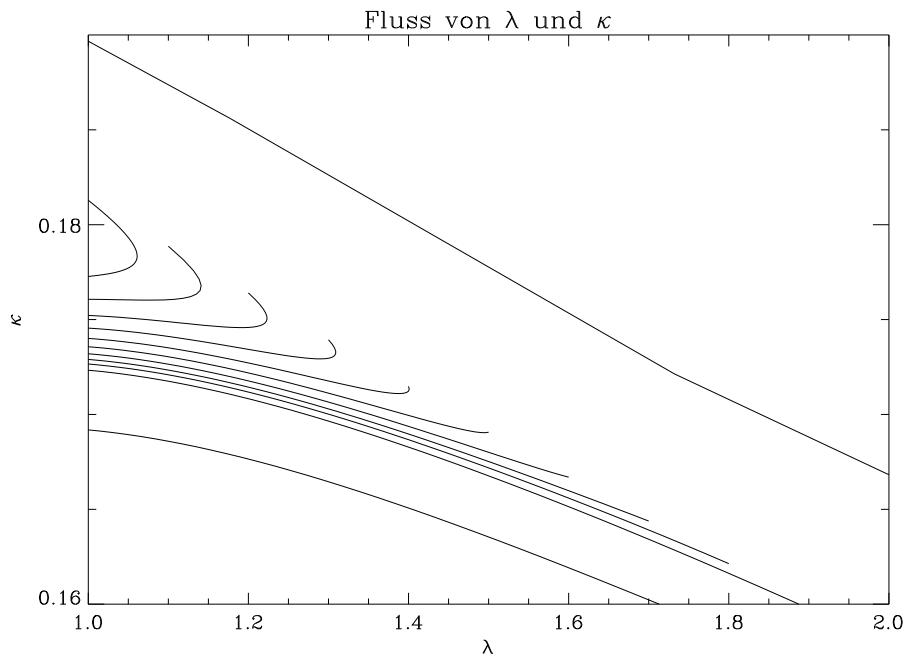


Abb. 5.9: RG-Fluß an der Austrittsstelle der renormierten Trajektorie aus der „verbotenen Zone“ ( $N = 1, 16$ . Ordnung)

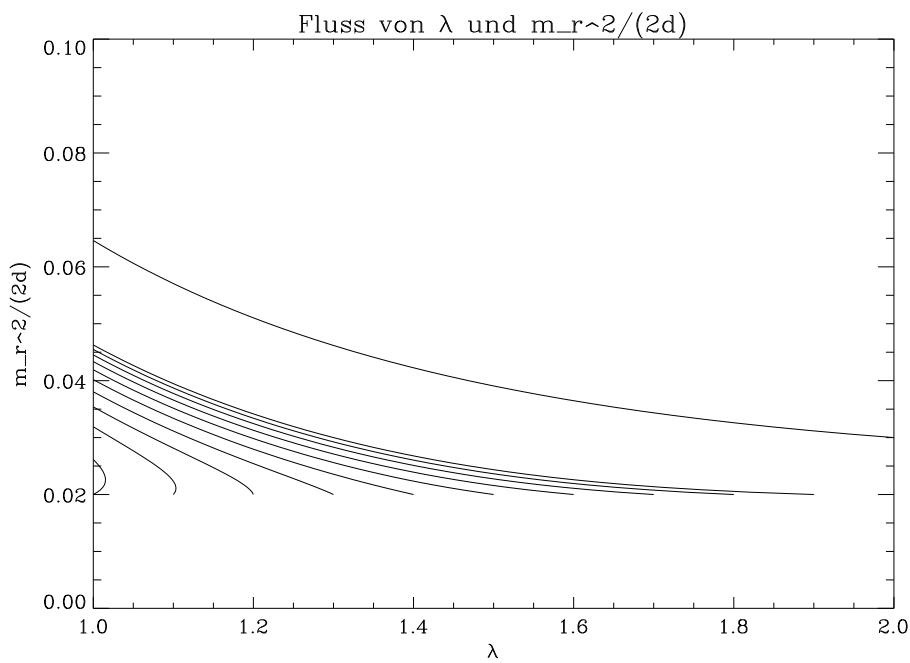


Abb. 5.10: RG-Fluß an der Austrittsstelle der renormierten Trajektorie aus der „verbotenen Zone“ ( $N = 1, 20$ . Ordnung)

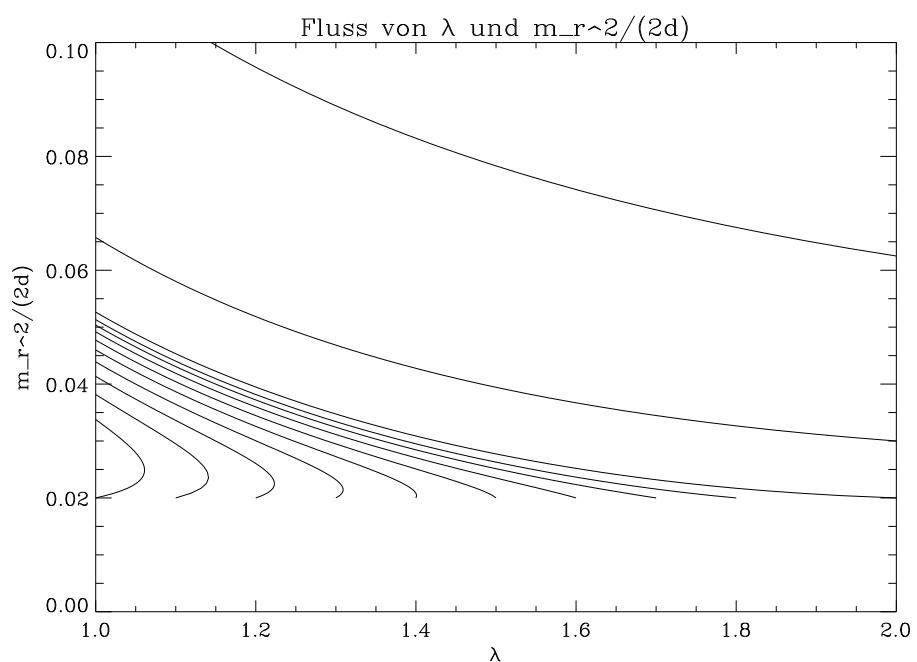


Abb. 5.11: RG-Fluß an der Austrittsstelle der renormierten Trajektorie aus der „verbotenen Zone“ ( $N = 1, 16.$  Ordnung)

### 5.5.1 Lineare Extrapolation: 1d-Fall

Man benötigt ein Verfahren, um aus den Flußdaten die Fixpunktkoordinaten zu extrahieren. Für einen eindimensionalen Fluß ist dieses einfach möglich. Dieses Verfahren wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

Betrachtet man den Fluß eines Eigenvektors  $\mathbf{s}$  der linearisierten RG am Fixpunkt zum Eigenwert  $\gamma$ , so hat man im Bereich der linearen Näherung das folgende Verhalten:

$$\mathcal{R}\mathbf{s} = \gamma\mathbf{s} .$$

Für die Beträge  $x$  eines Vektors, der proportional zu  $\mathbf{s}$  ist,  $\mathbf{x} = x\mathbf{e}_s$ , gilt daher unter wiederholter RG-Transformation:

$$\mathcal{R}^n x =: x_n = \gamma^n(x - x_*) + x_* .$$

Jetzt sei die Lage  $x_*$  des Fixpunktes unbekannt und auch der Eigenwert  $\gamma$ . Aus dem Fluß sollen beide Informationen extrahiert werden.

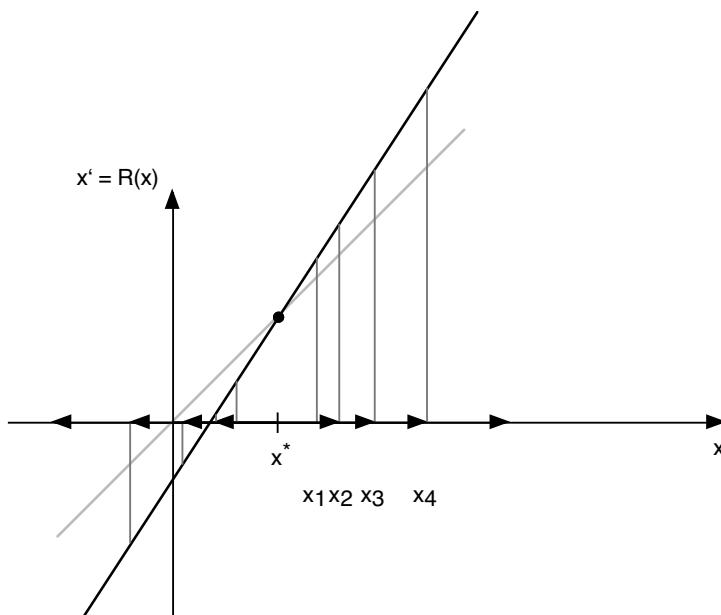


Abb. 5.12: 1d RG-Fluß im linearen Bereich; relevanter Eigenwert

Solange der Fluß im linearen Bereich ist und gut durch den Einfluß nur eines Eigenvektors beschrieben wird, gilt:

$$\begin{aligned} x_1 &= (x_1 - x_*) + x_* = v + x_* \\ x_2 &= \mathcal{R}x_1 = \gamma(x_1 - x_*) + x_* \\ x_3 &= \mathcal{R}^2x_1 = \gamma^2(x_1 - x_*) + x_* , \end{aligned}$$

Subtraktion ergibt

$$\begin{aligned} x_2 - x_1 &= (\gamma - 1)(x_1 - x_*) \\ x_3 - x_2 &= (\gamma^2 - \gamma)(x_1 - x_*) = \gamma(\gamma - 1)(x_1 - x_*) . \end{aligned}$$

Durch Division erhält man

$$\gamma = \frac{x_3 - x_2}{x_2 - x_1} . \quad (5.1)$$

Aus der Gleichung für  $x_2 - x_1$  ergibt sich die Bestimmungsgleichung für  $x_*$

$$x_* = x_1 - \frac{x_2 - x_1}{\gamma - 1} . \quad (5.2)$$

Wenn es sich nicht um einen marginalen Eigenvektor mit  $\gamma = 1$  handelt, ergibt dies den Fixpunkt der Kopplung  $x$ . Durch die Bildung der Differenzen in den Bestimmungsgleichungen verliert man allerdings an Genauigkeit bei der Berechnung.

Ferner ist Voraussetzung, daß der Fluß näherungsweise auf einer aus- oder einlaufenden Trajektorie des nichttrivialen Fixpunktes liegt und die lineare Näherung ausreichend ist. Der Fluß entlang der kritischen Linie bzw. entlang der renormierten Trajektorie ergibt also eine Schätzung für die Fixpunktswerte  $\kappa_*, \lambda_*$ .

Aufgrund des Konvergenzverhaltens der LCE muß man einen gewissen Abstand von der kritischen Linie halten. Die renormierte Trajektorie kann man jedoch im Prinzip genau bestimmen, wenn auch erst in einem gewissen Abstand vom Fixpunkt. Auf der renormierten Trajektorie wird der Fluß im linearen Bereich durch das relevante scaling field bestimmt. Wenn der Betrag des Vektors Differenzen der Kopplungen von den Fixpunktswerten mit einer Konstanten multipliziert wird, trifft dies auch auf die einzelnen Komponenten des Vektors zu. Daher kann man den Eigenwert und die Werte der Fixpunktverkopplungen aus dem Fluß der einzelnen Kopplungen bestimmen, wenn man die renormierte Trajektorie bestimmt hat. Eine Trajektorie, die für beide Kopplungen die gleichen Eigenwerte nach (5.1) liefert, ist die renormierte Trajektorie.

### 5.5.2 Lineare Extrapolation: 2d-Fall

Mit einer Verallgemeinerung der oben besprochenen Methode ist die Bestimmung aller interessierenden Daten aus dem zweidimensionalen RG-Fluß möglich. Die Grundgleichung für den Fluß lautet mit den Eigenvektoren  $\mathbf{s}_j$  zu den Eigenwerten  $\gamma_i$ :

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{v}_* \mapsto \mathbf{v}_2 = \gamma_1 \mathbf{s}_1 + \gamma_2 \mathbf{s}_2 + \mathbf{v}_*$$

Mit  $\mathbf{v}_n$  sei der Vektor bezeichnet, auf den  $n$ -mal die linearisierte RG-Transformation angewendet worden sei. Es gilt dann

$$\mathbf{v}_n = \gamma_1^{n-1} \mathbf{s}_1 + \gamma_2^{n-1} \mathbf{s}_2 + \mathbf{v}_*$$

und für  $i \geq 2$  sei

$$\Delta_i := \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{i-1} = \gamma_1^{i-2}(\gamma_1 - 1)\mathbf{s}_1 + \gamma_2^{i-2}(\gamma_2 - 1)\mathbf{s}_2.$$

Umformen von  $\Delta_2$  nach  $\mathbf{s}_1$  ergibt

$$\mathbf{s}_1 = \frac{\Delta_2 - (\gamma_2 - 1)\mathbf{s}_2}{\gamma_1 - 1},$$

und entsprechend erhält man aus  $\Delta_3$  für  $\mathbf{s}_2$  unter Berücksichtigung der Formel für  $\mathbf{s}_1$

$$\mathbf{s}_2 = \frac{\Delta_3 - \gamma_1\Delta_2}{(\gamma_2 - 1)(\gamma_2 - \gamma_1)}.$$

Durch Einsetzen dieses Resultats in die Formel für  $\mathbf{s}_1$  erhält man das folgende Resultat, was man auch einfach durch Vertauschen der Indizes der Eigenwerte erhält:

$$\mathbf{s}_1 = \frac{-\Delta_3 + \gamma_2\Delta_2}{(\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - \gamma_1)}.$$

Damit sind nur noch die Eigenwerte zu bestimmen. Dazu muß noch ein weiterer RG-Schritt hinzugenommen werden. Eine kurze Rechnung ergibt:

$$\Delta_4 = (\gamma_2 + \gamma_1)\Delta_3 - \gamma_1\gamma_2\Delta_2$$

Diese Gleichung zerlegt man nun in die beiden Komponenten, dann bleiben zwei Gleichungen für die beiden Unbekannten  $\gamma_1$  und  $\gamma_2$ .

$$\Delta_4^i = (\gamma_2 + \gamma_1)\Delta_3^i - \gamma_1\gamma_2\Delta_2^i$$

Präparation von  $\gamma_1$  aus der ersten Gleichung liefert

$$\gamma_1 = \frac{\Delta_4^1 - \gamma_2\Delta_3^1}{\Delta_3^1 - \gamma_2\Delta_2^1}.$$

Im letzten Schritt wird dieses Ergebnis in die Gleichung für die zweite Komponente eingesetzt

$$\Delta_4^2 = (\gamma_2 + \frac{\Delta_4^1 - \gamma_2\Delta_3^1}{\Delta_3^1 - \gamma_2\Delta_2^1})\Delta_3^2 - \frac{\Delta_4^1 - \gamma_2\Delta_3^1}{\Delta_3^1 - \gamma_2\Delta_2^1}\gamma_2\Delta_2^2$$

$$\begin{aligned}
& (\Delta_3^1 - \gamma_2 \Delta_2^1) \Delta_4^2 \\
&= (\gamma_2(\Delta_3^1 - \gamma_2 \Delta_2^1) + (\Delta_4^1 - \gamma_2 \Delta_3^1)) \Delta_3^2 - (\Delta_4^1 - \gamma_2 \Delta_3^1) \gamma_2 \Delta_2^2 \\
&= (\Delta_4^1 - \gamma_2^2 \Delta_2^1) \Delta_3^2 - (\gamma_2 \Delta_4^1 - \gamma_2^2 \Delta_3^1) \Delta_2^2 \\
&= \Delta_4^1 \Delta_3^2 - \gamma_2 \Delta_4^1 \Delta_2^2 + \gamma_2^2 (\Delta_3^1 \Delta_2^2 - \Delta_2^1 \Delta_3^2)
\end{aligned}$$

Zusammengefaßt hat man also

$$\gamma_2^2 (\Delta_3^1 \Delta_2^2 - \Delta_2^1 \Delta_3^2) + \gamma_2 (\Delta_2^1 \Delta_4^2 - \Delta_4^1 \Delta_2^2) + (\Delta_4^1 \Delta_3^2 - \Delta_3^1 \Delta_4^2) = 0 ,$$

wodurch  $\gamma_2$  bestimmt ist und nun  $\gamma_1$  und die  $s_i$  berechnet werden können.

Allerdings ist diese Gleichung für die Berechnung kritischer Daten ungeeignet. Durch die mehrfachen Differenzen, die in den Gleichungen vorkommen, verschwindet das Ergebnis im numerischen Rauschen. Das ist der Preis dafür, die renormierte Trajektorie nicht bestimmen zu müssen. Für die numerische Berechnung der kritischen Größen muß dieses Vorgehen daher verworfen werden.

### 5.5.3 Resultat dieser Überlegungen

Aus den Daten des zweidimensionalen Flusses im Bereich der linearen Näherung kann man zwar im Prinzip den Fixpunkt, die Eigenvektoren der linearisierten RG-Transformation und die Eigenwerte direkt berechnen, aber die numerische Ungenauigkeit ist zu groß, um für die numerische Berechnung nützlich zu sein. Daher sind zur Bestimmung der renormierten Trajektorie andere Verfahren nötig.

## 5.6 Renormierte Trajektorie

Die Bestimmung der kritischen Trajektorie wurde basierend auf der Hypothese durchgeführt, daß der näherungsweise lineare Bereich sich bis in das Gebiet mit  $\frac{m_r^2}{2d} \leq 0.04$  erstreckt, in dem die Flussbestimmung im Fall  $N = 1$  zuverlässige Ergebnisse liefert. Es wurde also angenommen, daß die renormierte Trajektorie sich dadurch von anderen RG-Trajektorien unterscheidet, daß sie in guter Näherung eine Gerade ist.

Daraufhin wurde das Krümmungsverhalten von RG-Trajektorien, die bei verschiedenen Werten von  $\lambda$  mit fest vorgegebenen Wert  $m_r^2/2d$  starten, untersucht. Durch Intervallhalbierung des Intervalls von  $\lambda$ , in dem die Krümmung von links- auf rechtsgekrümmt wechselt, konnte ein Kandidat für die kritische Trajektorie bestimmt werden.

Bei diesem Vorgehen gibt es zwei Punkte zu beachten. Die Hypothese könnte nicht zutreffen. Wenn der lineare Bereich der RG-Transformation noch innerhalb des Bereiches endet, in dem die LCE keine zuverlässigen Ergebnisse liefert, dann ist das untersuchte Verfahren nicht anwendbar. Den linearen Bereich erkennt man daran, daß sich die Ableitung der RG-Transformation in diesem Bereich nicht stark ändert, denn eine näherungsweise lineare Abbildung,

$$\mathbf{x} \mapsto \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathcal{O}(\|\mathbf{x}\|^2)$$

die durch eine Matrix  $\mathbf{A}$  gegeben ist, hat näherungsweise diese Matrix als Ableitung. Ein Indikator dafür, daß diese Hypothese stimmt, ist also, daß die aus der Matrix berechneten kritischen Exponenten in diesem Bereich näherungsweise konstant sind. Zweitens ist die renormierte Trajektorie selbst auch gekrümmt, wenn man die nichtlinearen Korrekturen berücksichtigt.

Eine zweite Information wurde verwendet, um die Hypothese zu überprüfen. Auf der renormierten Trajektorie werden die Differenzen von  $\kappa$  und  $\lambda$  von ihren Fixpunktwerten mit dem gleichen Faktor  $L^{\frac{1}{\nu}}$  multipliziert. Daher sollte sich auf der kritischen Trajektorie

$$\frac{\kappa_3 - \kappa_2}{\kappa_2 - \kappa_1} = \frac{\lambda_3 - \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} = \gamma_1 = L^{\frac{1}{\nu}}$$

für je drei durch RG-Transformationen erzeugte Paare der Kopplungen  $\kappa, \lambda$  ergeben. Ferner sollte  $\gamma_1 > 1$  gelten, genauer sogar  $\gamma_1 > L$ . Dies konnte nachgewiesen werden.

Die dritte Information ist die lineare Extrapolation der ungekrümmten Trajektorie in den Bereich großer  $\lambda$  nach 5.5.1 und die Bestimmung des Schnittpunktes der so erhaltenen Geraden mit der kritischen Linie, die von Reisz [Rei99] und von Hasenbusch [Has99] angegeben wurde. Als weiteren Test kann man dort den Wert von  $\kappa$  ablesen und mit dem extrapolierten Wert vergleichen.

Für die anomale Dimension wurde neben  $\eta = 0$  auch  $\eta = 0.0366$  verwendet, der durch verschiedene Autoren numerisch bestimmt wurde (Vgl. Tabelle 1.2 und die Zitate dort.).

Die Tabellen E.16, E.19 und E.22 zeigen Flüsse unterhalb der renormierten Trajektorie, die bei verschiedenen renormierten Massen starten. Man erkennt vor allem an der Spalte für den Quotienten der geschätzten Eigenwerte und an der letzten Spalte mit der Krümmung der Trajektorie (sie ist rechtsgekrümmt als Funktion von  $\lambda$  aufgefaßt), daß man nicht auf der kritischen Trajektorie ist. Die beiden errechneten Eigenwerte weichen voneinander um bis zu einige Prozent ab.

Die Tabellen E.14, E.17 und E.20 zeigen Flüsse oberhalb der renormierten Trajektorie, die von links- auf rechtsgekrümmt wechseln. Sie schmiegen sich immer mehr an die kritische Trajektorie an, wie man an dem Verhältnis der aus dem Fluß von  $\kappa$  bzw.  $\lambda$  berechneten Eigenwerte sehen kann. Beim Wechsel der Krümmung wechselt

auch das Verhältnis von  $< 1$  nach  $> 1$ . Die Abweichung der beiden Eigenwerte wird kleiner bis zum Wechsel der Krümmung, dann wird sie wieder größer. Interessanterweise ist der kritische Exponent  $\nu$ , den man aus diesen Eigenwerten berechnen kann (unter Beachtung der oben gemachten Bemerkung über die erwartete Genauigkeit), beim Wechsel von Rechts- auf Linkskrümmung zumindest auf der ersten Nachkommastelle übereinstimmend mit dem an dieser Stelle durch Diagonalisierung der Ableitungsmatrix berechneten Exponenten.

Die Tabellen E.15, E.18 und E.21 zeigen Flüsse, die nahe bei den Startwerten der renormierten Massen  $m_r^2/(2d) = 0.035, 0.040, 0.045$  die Krümmung wechseln. Wie erwartet sind die Eigenwerte dort etwa gleich und größer als 1. Damit sind sie die Kandidaten für die renormierten Trajektorien an diesen Stellen. Sie ergeben nach dem Verfahren aus Abschnitt 5.5.1 die Schätzwerte

$$\begin{aligned}\kappa^* &= 0.1827, \lambda^* = 1.2267, & \nu(\kappa = 0.17951, \lambda = 0.8805) &= 0.54, \\ \kappa^* &= 0.1860, \lambda^* = 1.0873, & \nu(\kappa = 0.18039, \lambda = 0.7872) &= 0.53 \text{ und} \\ \kappa^* &= 0.1889, \lambda^* = 0.9610, & \nu(\kappa = 0.18087, \lambda = 0.6975) &= 0.53\end{aligned}$$

der Lage des Fixpunktes. Zusammen ergibt dies  $(\kappa^* = 0.186(3), \lambda^* = 1.09(14))$ . Gleichzeitig bekommt man erste Schätzungen der kritischen Exponenten. Hierbei ist natürlich die Bemerkung in Abschnitt 5.5.1 zur numerischen Genauigkeit zu beachten.

Zum unabhängigen Vergleich wurden zu den gefundenen Werten von  $\lambda^*$  aus den Daten aus [Rei99, Has99] über die Lage der kritischen Trajektorie die zugehörigen Werte von  $\kappa_c$  bestimmt. Man erhält

$$\begin{aligned}\kappa_c(\lambda = 1.227) &= 0.1855 \text{ bzw. } 0.1844 \\ \kappa_c(\lambda = 1.087) &= 0.1877 \text{ bzw. } 0.1878 \\ \kappa_c(\lambda = 0.961) &= 0.1906 \text{ bzw. } 0.1908.\end{aligned}$$

Die erste Spalte ist durch lineare Interpolation der Resultate aus [Rei99], die zweite Spalte durch Interpolation der Resultate aus [Has99] bestimmt. Im ersten Fall stimmt dies auf 1.5%, in den übrigen fünf Fällen auf 0.9% mit den gefundenen Werten überein.

### 5.6.1 Vergleich mit anderen Resultaten

Mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen wurde in [BFMMS98] für die  $\phi^4$ -Theorie der Wert von  $\lambda$  bestimmt, für den die Korrekturen proportional zu  $L^{-\omega}$  zum Verhältnis der Binder-Kumulantens verschwinden. Es wird argumentiert, daß ein solcher Punkt zu einem Fixpunkt der RG-Transformation gehört. Sie geben einen Wert von  $\lambda = 1.0(1)$  für Gitter mit den Kantenlängen  $L = 8, \dots, 32$  an.

Ein analoges Verfahren wird in [HPV98] für die  $\phi^4$ -Theorie benutzt. In dieser Arbeit werden zwei universelle Verhältnisse benutzt, das Verhältnis der Partitionsfunktionen mit periodischen und antiperiodischen Randbedingungen, sowie die Binder-Kumulante. Diese universellen Verhältnisse wurden zuvor berechnet und mit ihrer Hilfe dann der Fluß der Kopplungen bestimmt. Daraus erhalten sie als Abschätzung für das optimale  $\lambda \approx 1.145$  für Gitter mit der Kantenlänge  $L = 7, 8, 9$ . Eine genaue Bestimmung des Wertes von  $\lambda$ , an dem die führenden Korrekturen zum Skalenverhalten verschwinden, wurde in [Has99] durchgeführt. Nach dieser Arbeit liegt der Wert von  $\lambda$  sehr nahe bei 1.1.

Mit diesen Werten stimmen die gefundenen Werte also im Rahmen der Fehler überein.

## 5.7 Kritische Exponenten

Nachdem im letzten Abschnitt schon erste Schätzwerte für kritische Exponenten berechnet wurden, wird in diesem Abschnitt ihre Berechnung in größerer Ausführlichkeit besprochen.

### 5.7.1 Naive Berechnung

Hat man den nichttrivialen Fixpunkt lokalisiert, so kann man mit der naiven Methode nach Gleichung 4.1  $\nu$  durch

$$\kappa' - \kappa^* = L^{\frac{1}{\nu}}(\kappa - \kappa^*)$$

berechnen.

### Zur Fehleranfälligkeit der Berechnung

Sei  $\lambda = L^\omega$ . Dann ist bei Variation des Exponenten

$$L^{\omega+\delta\omega} = L^\omega + \log L(1 + \omega \log L)\delta\omega + \mathcal{O}(\delta\omega^2) = \lambda + \delta\lambda ,$$

d.h.

$$\frac{\delta\omega}{\delta\lambda} = \frac{1}{\log L(1 + \omega \log L)}$$

Die Fehler bei der Bestimmung des Exponenten wird also immer größer, je näher  $L$  bei 1 liegt. Da  $\omega = \frac{1}{\nu}$  ist, gilt

$$\delta\omega = -\frac{\delta\nu}{\nu^2} ,$$

also

$$\frac{\delta\nu}{\delta\lambda} = -\frac{\nu^2}{\log L(1 + \frac{1}{\nu} \log L)}.$$

$\nu$  ist kleiner als 1, aber als Faustformel kann man jedoch  $\nu = 1$  annehmen und erhält dann für  $L \approx 1$

$$\delta\nu \approx \frac{1}{L-1} \delta\lambda.$$

Da man in der Nähe des kritischen Punktes mit  $L$  nahe bei 1 rechnen muß, muß man also die Daten, die für die Bestimmung des Exponenten berechnet werden, mit großer Genauigkeit zu bestimmen. Angenommen, man habe  $\kappa, \kappa'$  und  $\kappa^*$  mit einer Genauigkeit von  $10^{-4}$  bestimmt. Der Bruch

$$\frac{\kappa' - \kappa^*}{\kappa - \kappa^*}$$

hat dann etwa die Genauigkeit  $10^{-3}$ . Mit  $\delta\lambda = 10^{-3}$  ergibt sich für typische Werte von  $L = 1.005$

$$\delta\nu \approx 200\delta\lambda = 2 \cdot 10^{-1},$$

also ein Fehler von 20%. Daran sieht man, wie genau die Bestimmung der einzelnen Größen erfolgen muß, um auf diese Weise zu zufriedenstellenden Resultaten zu gelangen. Um  $\nu$  bei diesem Wert von  $L$  auf 3 Stellen genau zu bestimmen, benötigt man eine Genauigkeit von

$$\delta\lambda = \frac{\delta\nu}{200} = 0.5 \cdot 10^{-5}.$$

Aufgrund der Differenzenbildung bei der oben besprochenen Methode, muß man also die verschiedenen Werte von  $\kappa$  mit einer Genauigkeit von  $10^{-6}$  bis  $10^{-7}$  berechnen. Die Lage des Fixpunktes ist jedoch nicht so genau bekannt.

Andererseits sind die Flußdaten aufeinanderfolgender RG-Schritte in diesem Licht doch für eine erste Schätzung des kritischen Exponenten zu gebrauchen. Dabei ist allerdings zu beachten, daß neben der rein numerischen Genauigkeit die systematischen Fehler, die man aufgrund der nur ungenau bekannten Lage der renormierten Trajektorie und ihrer Krümmungseigenschaften erhält, berücksichtigt werden müssen.

### 5.7.2 Linearisierung der Abbildung $(\kappa, \lambda) \rightarrow (\kappa', \lambda')$

Entlang der kritischen Trajektorie ist man weit vom Fixpunkt entfernt, weil die kritische Trajektorie sehr lange durch den mittels LCE unzugänglichen Teil der  $(\kappa, \lambda)$ -Ebene läuft. Aber da der kritische Punkt nun zumindest näherungsweise

bekannt ist, ist es nun möglich, eine weitere Methode einzusetzen. Man berechnet die Matrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} & \frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} & \frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} \end{pmatrix}$$

in der Nähe des Fixpunktes und berechnet ihre Eigenwerte und Eigenvektoren.

Auch diese Berechnung ist sehr anfällig gegen numerische Fehler, und es gilt, einen ausgewogenen Kompromiss zu finden.  $L$  darf nicht so groß sein, daß man mit einem RG-Schritt den linearen Bereich verläßt, sollte aber möglichst groß sein, um den Fehler für den Eigenwert und erst recht den kritischen Exponenten klein zu halten.

Ferner ist die Berechnung der Ableitungen kritisch. Man verliert leicht deutlich an numerischer Genauigkeit, wenn man die Ableitungen „naiv“ berechnet [PTVF92]. Es wurde daher auf eine Routine aus den „Numerical Recipes“ zurückgegriffen, um die Ableitungen zu berechnen. Die Routine `drkdfj` berechnet Ableitungen nach „Richardson’s deferred approach to the limit“ und liefert auch Abschätzungen für die Fehler bei der Berechnung. Mit Hilfe dieser Fehler kann man Fehlerabschätzungen für die Eigenwerte der Matrix und für die kritischen Exponenten erhalten.

Eine weitere technische Schwierigkeit war dabei zu überwinden. Der Algorithmus benutzt zur Fehlerreduzierung die Formel

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

für die numerische Berechnung der Ableitung. Dies ist für das vorliegende Problem zum Teil nicht gut geeignet, weil die Ableitung nahe an der „verbotenen Zone“ ausgewertet werden soll. Daher liegt  $x + h$  bereits in diesem Bereich, wenn  $x$  nahe daran liegt und  $h$  relativ groß ist. Damit werden die Ergebnisse aber unzuverlässig. Die Routine wurde deswegen so umgeschrieben, daß man alternativ die Formel

$$\frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

benutzen kann. Die Konvergenz der Routine wurde dadurch langsamer und die maximale Anzahl an Iterationen mußte erhöht werden. Durch einen Mehraufwand an Rechenzeit konnten die von der Routine berechneten Fehler aber dennoch ähnlich klein gehalten werden, wie bei der Originalroutine.

Die technische Implementation besteht aus einem weiteren C-Programm `1rg`, das über ein Perl-Script die Funktionswerte berechnet, die die Routine zu Berechnung der Ableitung benötigt. Für die Berechnung der Funktionswerte mußte ferner das Programm `mrfow` so angepaßt werden, daß es den Fluß von  $\kappa, \lambda$  so berechnet, daß  $\kappa$  und nicht  $m_r^2/2d$  als Startparameter verwendet wird.

$\lambda$	Ableitungsmatrix	Eigenwerte	$\nu$
1.0	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 1.0007017133$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.3263874435$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.0005781562$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.9865910949$	1.00908921 0.97820360
1.0	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 1.0007017180(3)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.3263878477(27)$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.0005781572(1)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.9865910573(44)$	1.0090892232(3) 0.978203552(2)
1.5	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 0.9971930055$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.5074234869$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.0003567941$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.9890047546$	1.00716328 0.97820359632
1.5	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 0.997193022(1)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.50742552(17)$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.000356810(1)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.98900428(7)$	1.00716345(5) 0.97903384(3)
2.0	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 1.0012379441(4)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.3658483020(1)$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.0003473261$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.9815394378(3)$	1.0063578743(6) 0.9764195075(1)
2.0	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 1.00123656(3)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.3659200(1)$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.000347273(6)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.98154286(7)$	1.0063575(1) 0.97642192(1)

Tab. 5.1: Ableitungsmatrix für  $N = 1, L = 1.005, \eta = 0, \text{TOLF} = 10^{-8}$   $\text{MR_REL_EPSILON} = 10^{-8}$  und  $\kappa = 0.15$  bei verschiedenen Werten von  $\lambda$ , berechnet zusammen mit den Fehlerangaben mit der Originalroutine und der modifizierten Routine `dfridr`.

Um die Routinen zu testen, wurden beide zunächst auf Teile des  $(\kappa, \lambda)$ -Raumes angewendet, bei dem beide verwendbar sind. Dort wurden die von ihnen gefundenen Werte und Fehler verglichen. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 5.1 und 5.2 zusammengestellt. Gleichzeitig geben diese Berechnungen einen ersten Eindruck der Variation der kritischen Exponenten bei diesem Verfahren.

Schon an diesen Rechnungen kann man sehen, daß  $\nu$  im Bereich des Fixpunktes noch über einen großen Bereich variiert. Unter der plausiblen Annahme, daß sich  $\nu$

$\lambda$	Ableitungsmatrix	Eigenwerte	$\nu$
1.0	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 1.0004818104$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.3209242650$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.0004934203$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.9900503887$	1.00888793 0.98164427
1.0	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 1.0004818206(4)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.32092336(3)$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.0004934220(2)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.99005031(1)$	1.00888791(1) 0.98164422(2)
1.5	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 1.9976594281(1)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.4514451788(12)$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.0003379002$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.9907101046(5)$	1.00701507 0.98135446
1.5	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \kappa} = 0.99765929(4)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \kappa} = 0.45144900(9)$	$\frac{\partial \kappa'}{\partial \lambda} = 0.000337340(15)$ $\frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} = 0.9907124(5)$	1.0070060(5) 0.9813656818(3)

Tab. 5.2: Ableitungsmatrix für  $N = 1, L = 1.005, \eta = 0, \text{TOLF} = 10^{-8}$   $\text{MR_REL_EPSILON} = 10^{-8}$  und  $\kappa = 0.16$  bei verschiedenen Werten von  $\lambda$ , berechnet zusammen mit den Fehlerangaben mit der Originalroutine und der modifizierten Routine `dfridr`.

zwischen den Werten an den berechneten Stellen stetig ändert, kann man also Werte von  $\nu$  errechnen, die den erwarteten Wert von  $\nu \approx 0.63$  überdecken. Einerseits ist dies ein Anhaltspunkt dafür, daß die Methode zumindest grundsätzlich funktioniert. Andererseits muß man die Wahl des Auswertepunktes genau begründen.

### Fehlerrechnung zur Eigenwertbestimmung

In den Tabellen 5.1 und 5.2 werden die Fehler angegeben, die von der Routine `dfridr` berechnet werden. Es handelt sich dabei nur um die rein numerischen Fehler. In diesem Abschnitt werden die Fehler, die bei der Bestimmung der Eigenwerte auftreten, untersucht. Für  $2 \times 2$ -Matrizen ist dieses Problem noch relativ übersichtlich. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\det \begin{pmatrix} X - a & -b \\ -c & X - d \end{pmatrix} = (X - a)(X - d) - bc = X^2 - (a + d)X + (ad - bc)$$

Für die Eigenwerte gilt also

$$\begin{aligned} \gamma_{1,2} &= \frac{a + d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a + d}{2}\right)^2 - (ad - bc)} \\ &= \frac{a + d}{2} \pm \sqrt{\frac{a^2 + d^2}{2} + bc} \end{aligned}$$

Für den Fehler erhält man dann

$$\delta\gamma = \frac{a + \delta a + d + \delta d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{(a + \delta a)^2 + (d + \delta d)^2}{2}\right)^2 + (b + \delta b)(c + \delta c) - \gamma}.$$

Bis zur ersten Ordnung lautet der Fehler also

$$\delta\gamma = \frac{\delta a + \delta d}{2} \pm \frac{1}{2} \frac{a\delta a + d\delta d + b\delta c + c\delta b}{\frac{a^2 + d^2}{2} + bc}.$$

Da die Werte von  $a$  und  $d$  etwa 1 sind und  $b$  immer einige Größenordnungen kleiner ist, erhält man als Approximation

$$\delta\gamma \approx \frac{\delta a + \delta d}{2} \pm \frac{1}{2} (\delta a + \delta d + b\delta c + c\delta b) \approx \delta a + \delta d + \frac{1}{2} (b\delta c + c\delta b). \quad (5.3)$$

In den Tabellen 5.1 und 5.2 wurden die Fehler der Eigenwerte und kritischen Exponenten dadurch bestimmt, daß alle Größen einmal für die errechneten Werte der Ableitungsmatrix und einmal für die fehlerbehafteten Werte berechnet wurden und die Abweichung dieser beiden Größen bestimmt wurde. Der so gefundene Fehler ist

$\kappa \setminus \lambda$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
0.18	0.544	0.537	0.534	0.533	0.536	0.570
0.17	0.547	0.543	0.544	0.549	0.559	0.574
0.16	0.548	0.541	0.539	0.543	0.551	0.565
0.15	0.553	0.542	0.536	0.536	0.542	0.553

Tab. 5.3: Kritischer Exponent  $\nu$  für  $N = 1, \eta = 0.0366$ , berechnet mit  $L = 1.005$ .

in den Tabellen angegeben, aber er stimmt gut mit dieser analytischen Abschätzung überein. Als Faustformel kann man feststellen: Tritt bei der Bestimmung der partiellen Ableitungen bei einer Ableitung ein Fehler auf, der sich um mindestens eine Größenordnung von den übrigen Fehlern unterscheidet, so ist dieser Fehler auch der Fehler des Eigenwertes. Bei der Bestimmung von  $c$  kann man sich jedoch größere Fehler erlauben, weil  $b$  in den untersuchten Fällen klein ist.

In Abschnitt 5.4 wurde der relative Fehler bei der Bestimmung der RG-Abbildung für kleine Massen zu 0.1 bis 0.2% bestimmt. Die Ableitungsroutine vergrößert diesen Fehler nach den vorliegenden Daten nicht. Für die Eigenwerte erwartet man aufgrund von (5.3) einen relativen Fehler von 0.3 bis 0.6%, also für  $\nu \approx 0.5$  einen Fehler von 1 bis 3 auf der dritten Nachkommastelle. Die weiteren Berechnungen von  $\nu$  werden daher mit drei Nachkommastellen durchgeführt.

### Bestimmung des kritischen Exponenten $\nu$

In den Tabellen 5.3 und 5.4 werden Ergebnisse für den kritischen Exponenten  $\nu$  aufgelistet, die bei verschiedenen Werten der Parameter  $\lambda$  und  $\kappa$  berechnet wurden. Der kritische Exponent  $\nu$  ist für  $\lambda < 1.2$  relativ stabil, wenn man den nötigen Abstand von der kritischen Linie beachtet. Dies stützt wieder die Hypothese, daß man sich im näherungsweise linearen Bereich der RG-Abbildung befindet. Die Bestimmung des Auswertungspunktes orientiert sich an der Schätzung der Fixpunktlage aus den vorhergegangenen Abschnitten. Der Fixpunkt wurde bei  $\lambda^* = 1.09(14)$  festgelegt. Den Tabellen entnimmt man an dieser Stelle einen Wert von

$$\nu = 0.595(20)$$

Dies stimmt nicht innerhalb des Fehlers mit den bekannten Werten von  $\nu$  überein.

## 5.8 Rechenzeiten

Typische Rechenzeiten für die Berechnung der  $2 \times 2$  Ableitungsmatrix betragen auf einem Pentium 2 unter Linux mit Hilfe der modifizierten Routine `dfridr` etwa 30

$\kappa \setminus \lambda$	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	2.0
0.18	0.570									
0.175	0.565		0.618	0.556						
0.174				0.688						
0.1725				0.682						
0.17	0.573	0.595	0.623	0.665	0.735					
0.165						0.714	0.647			
0.16	0.564	0.584	0.609	0.640	0.676	0.714	0.731	0.669	0.448	
0.15	0.553	0.569	0.592	0.620	0.656	0.701	0.753	0.813	0.867	0.787

Tab. 5.4: Kritischer Exponent  $\nu$  für  $N = 1, \eta = 0.0366$ , berechnet mit  $L = 1.005$ .

Minuten. Pro zu berechnender Ableitung wird die RG-Abbildung dabei 40-50 mal an verschiedenen Stellen ausgewertet. Die Originalroutine `dfridr` benötigt dagegen nur etwa 5 Minuten und wertet pro Ableitung die RG-Abbildung an 8-10 Stellen aus.

Die Berechnung eines kompletten Flußbildes benötigt ebenfalls etwa eine halbe Stunde.

## 5.9 $N = 2$

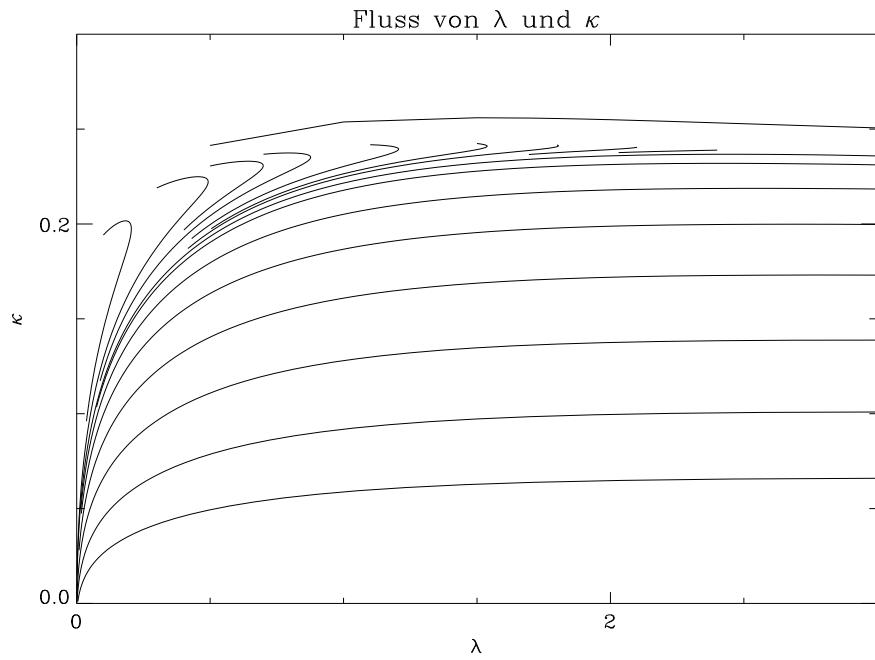
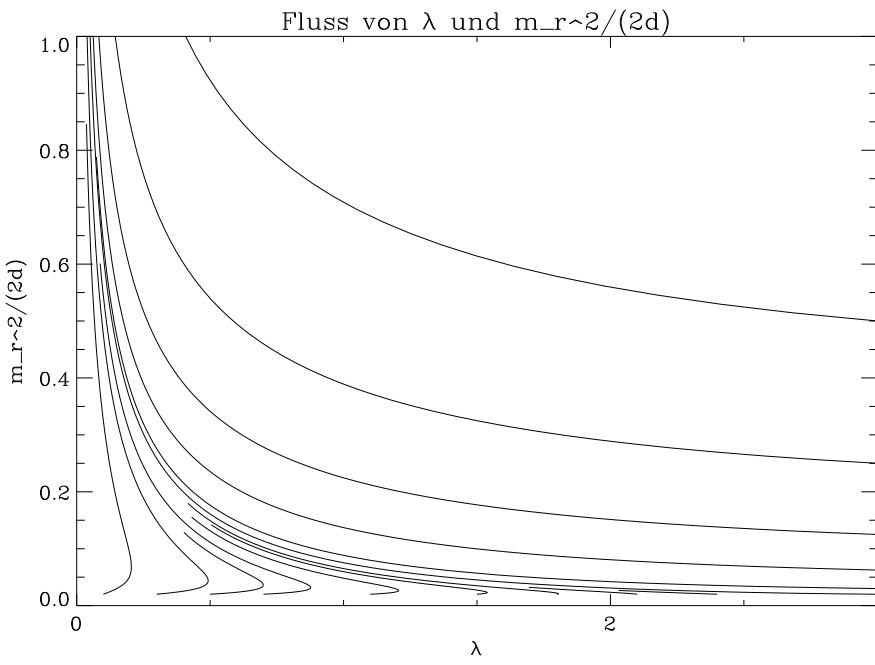
Für  $N = 2$  stand die Reihenentwicklung nur bis zu 16. Ordnung zur Verfügung. Dadurch wird die numerische Unsicherheit deutlich größer. Die Verfahren bleiben jedoch die gleichen wie im Fall  $N = 1$ . Daher werden nur kurz die Ergebnisse zusammengefaßt.

### 5.9.1 Genauigkeit der Inversion

Die Tabellen E.5 und E.6 zeigen die Verletzung der Skalenrelation. Die größten relativen Fehler treten wie für  $N = 1$  bei  $\lambda$  auf und liegen bei  $1 \cdot 10^{-6}$  bis  $2 \cdot 10^{-6}$  für  $L = 1.01$  und  $1 \cdot 10^{-4}$  bis  $2 \cdot 10^{-4}$  für  $L = 1.1$ . Diese Fehler sind von der gleichen Größenordnung wie diejenigen, die für  $N = 1$  auftreten.

### 5.9.2 Flußbilder und systematische Fehler

Die Bilder 5.13 und 5.14 zeigen Flußbilder für  $N = 2$ . Da die Ordnung der Entwicklung niedriger ist, erwartet man, daß die renormierte Masse größer sein muß, als im Fall  $N = 1$ , um noch verlässliche Resultate zu liefern. Den qualitativen Fehler durch

Abb. 5.13: RG-Fluß ( $N = 2$ )Abb. 5.14: RG-Fluß ( $N = 2$ )

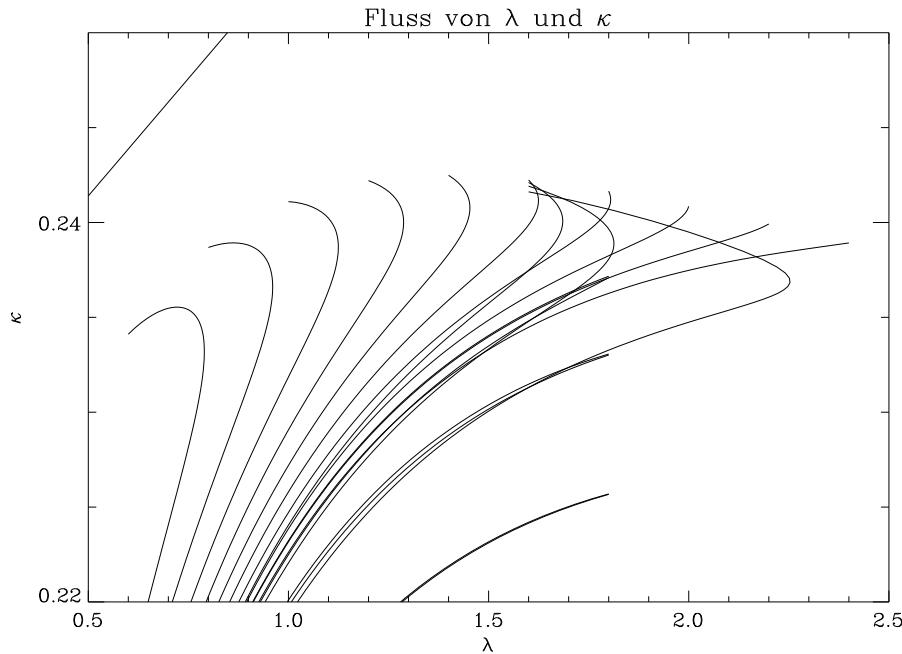


Abb. 5.15: RG-Fluß ( $N = 2$ ),  $\lambda = 1.8, L = 16, 14$   $m_r^2/(2d) = 0.02, 0.03, 0.04, 0.06$  und  $\lambda = 1.6, m_r^2/(2d), L = 10, 12, 14, 16$  im Vergleich.

die endlichen Reihen kann man auf den Bildern 5.15 und 5.16 erkennen. Sie sind von der gleichen Form, wie diejenigen für  $N = 1$ .

Quantitative Resultate werden in den Tabellen E.11, E.12 und E.13 angegeben. Es werden RG-Schritte, die mit Reihen der Ordnungen 14, 15 und 16 berechnet wurden, verglichen. Der Unterschied zwischen den mit den Reihen zur 14. und 16. Ordnung berechneten Flüssen ist geringer als der zwischen den mit den Reihen zur 15. und 16. Ordnung berechneten. Bei  $m_r^2/(2d) = 0.03$  treten relative Fehler von 2% (Differenz von 16. und 15. Ordnung) bzw. 0.2% (Differenz von 16. und 14. Ordnung) auf. Diese werden für größere renormierte Massen kleiner. Bei  $m_r^2/(2d) = 0.02$  unterscheiden sich die Flüsse der Abbildungen bereits deutlich.  $m_r^2/(2d) = 0.03$  ist daher die kleinste Masse, die man für die Berechnung von quantitativen Resultaten verwenden kann.

### 5.9.3 Lokalisierung des Fixpunktes

Die Lokalisierung des Fixpunktes ist für  $N = 2$  deutlich schwieriger als für  $N = 1$ . Auf einer Seite ist die Ordnung der Reihe geringer. Auf der anderen Seite sind die Trajektorien stark gekrümmt (Abb. 5.17, 5.18). Der Kandidat für die

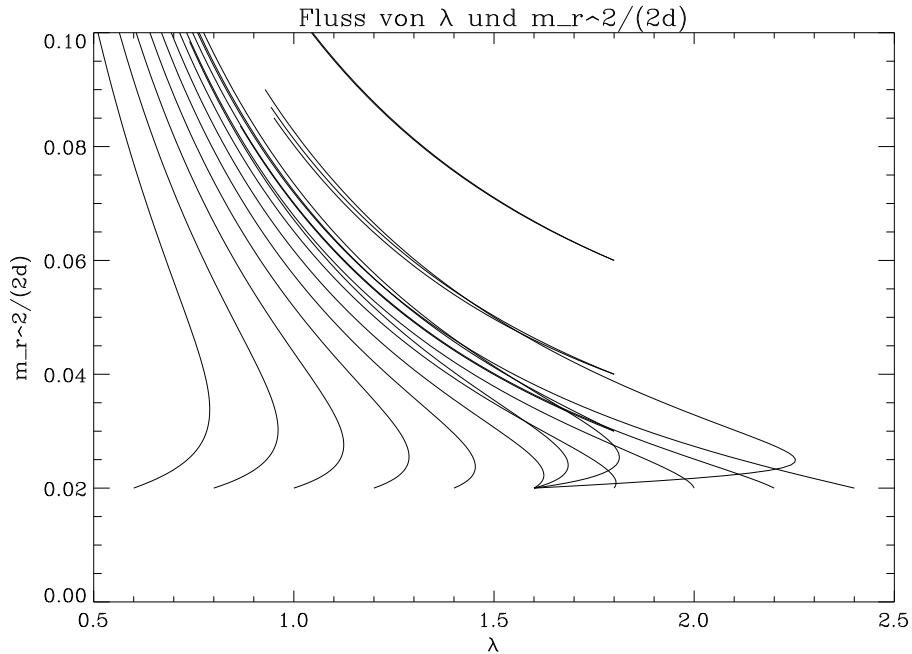


Abb. 5.16: RG-Fluß ( $N = 2$ ),  $\lambda = 1.8$ ,  $L = 16, 14$   $m_r^2/2d = 0.02, 0.03, 0.04, 0.06$  und  $\lambda = 1.6$ ,  $m_r^2/(2d)$ ,  $L = 10, 12, 14, 16$  im Vergleich.

renormierte Trajektorie variiert stark mit der renormierten Masse. Dies spricht dafür, daß man mit den Reihen zur 16. Ordnung noch nicht weit genug in das Gebiet der linearen Näherung hereinkommt. Während bei  $m_r^2/(2d) = 0.03$  noch

$$\kappa_* = 0.2486, \quad \lambda_* = 2.2488$$

nach der in Abschnitt 5.5.1 vorgestellten Methode resultiert (Tabelle E.24), verringert sich bei  $m_r^2/(2d) = 0.04$  der Schätzwert von  $\lambda_*$  auf unter 1.0.

Dennoch deckt sich dieses Resultat zumindest näherungsweise mit dem Resultat  $\lambda = 2.10(1)[5]$  von Hasenbusch und Török [HT99] (Vgl. auch 5.6.1). Aus den dort angegebenen Werten zur kritischen Linie ergibt sich durch lineare Interpolation

$$\kappa_c(\lambda = 0.2486) = 0.2539.$$

Dies sind etwa 2% Abweichung vom berechneten Wert von  $\kappa_*$ .

#### 5.9.4 Kritischer Exponent

In den Tabellen 5.5 und 5.6 sind kritische Exponenten zusammengestellt, die an verschiedenen Punkten des Parameterraumes berechnet wurden. Da der Fehler bei

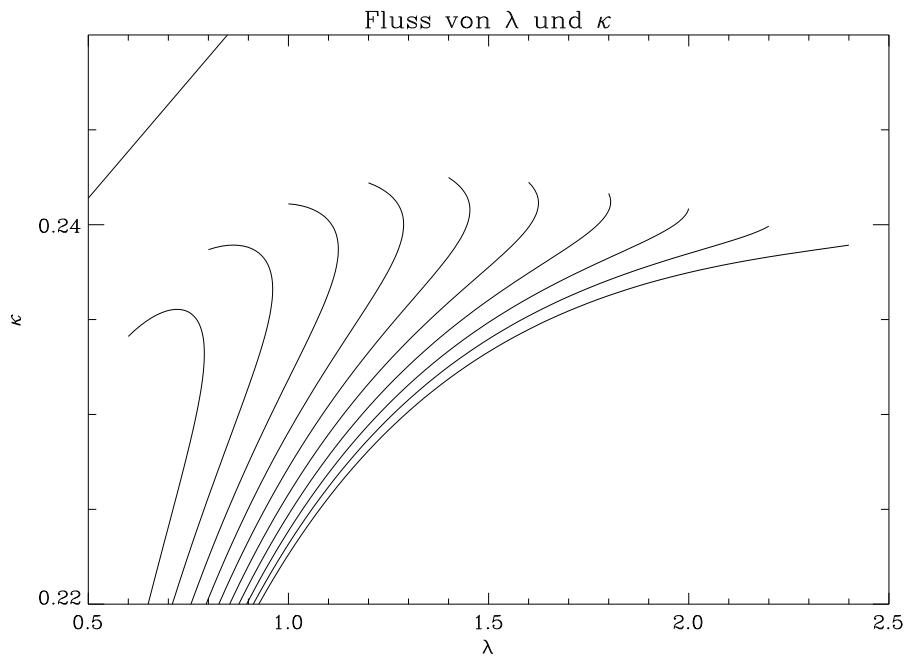


Abb. 5.17: RG-Fluß an der Austrittsstelle der renormierten Trajektorie aus der „verbotenen Zone“ ( $N = 2$ )

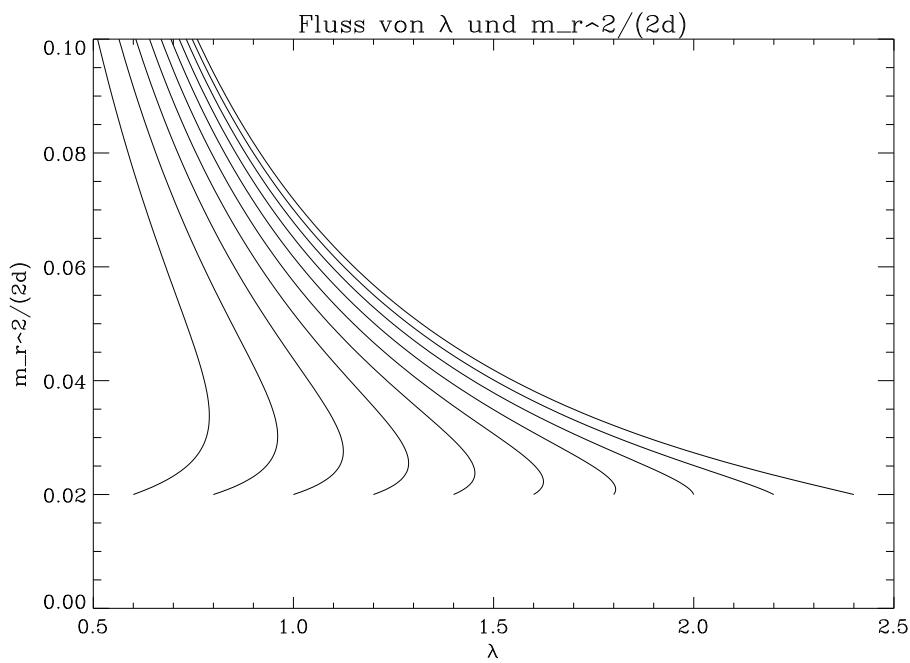


Abb. 5.18: RG-Fluß an der Austrittsstelle der renormierten Trajektorie aus der „verbotenen Zone“ ( $N = 2$ )

$\kappa \setminus \lambda$	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9
0.23	0.481	0.485	0.491	0.499	0.508	0.519	0.531	0.546	0.562	0.579
0.22	0.501	0.505	0.511	0.519	0.528	0.538	0.551	0.565	0.580	0.598
0.21	0.505	0.508	0.513	0.520	0.528	0.538	0.551	0.564	0.580	0.597
0.20	0.505	0.508	0.512	0.519	0.527	0.537	0.549	0.562	0.578	0.595

Tab. 5.5: Kritischer Exponent  $\nu$  für  $N = 2, \eta = 0.0366$ , berechnet mit  $L = 1.005$ .

$\kappa \setminus \lambda$	2.0	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
0.23	0.598	0.619	0.642	0.666	0.691	0.716	0.739	0.759	0.773	0.778
0.22	0.616	0.637	0.659	0.683	0.708	0.734	0.760	0.787	0.812	0.835
0.21	0.616	0.637	0.660	0.685	0.711	0.740	0.770	0.803	0.836	0.871
0.20	0.614	0.635	0.658	0.683	0.710	0.740	0.772	0.807	0.844	0.884

Tab. 5.6: Kritischer Exponent  $\nu$  für  $N = 2, \eta = 0.0366$ , berechnet mit  $L = 1.005$ .

der Bestimmung der RG-Abbildung fast eine Größenordnung größer ist, als im Fall  $N = 1$ , erwartet man dies auch für die Bestimmung des kritischen Exponenten. Ferner ist die Bestimmung des Auswertepunktes mit einer großen Unsicherheit behaftet. Daher ist die Bestimmung des kritischen Exponenten aus der berechneten Tabelle nicht sehr genau. Wenn man  $\lambda_* = 2.1(2)$  annimmt, was mit den oben erhaltenen Ergebnissen konsistent ist, so erhält man

$$\nu = 0.62(5) .$$

Dies ist im Vergleich mit den experimentellen und theoretischen Werten zu niedrig, aber im Rahmen des (großen) Fehlers verträglich mit ihnen.

# KAPITEL 6

---

## Résumé

---

In dieser Arbeit wurde eine Kombination von Renormierungsgruppenverfahren mit der Linked Cluster Entwicklung untersucht. Es wurden Renormierungsgruppenflüsse der beiden Kopplungen  $\kappa$  und  $\lambda$  berechnet. Ferner wurden die Fehler analysiert, die aufgrund der verschiedenen nötigen Approximationen auftreten.

Es wurde untersucht, ob man durch Auswertung der so gewonnenen Flußdaten kritische Exponenten berechnen kann und ob sich der erfolgreiche Einsatz der Linked Cluster Entwicklung zur Berechnung kritischer Exponenten  $\mathbb{Z}_2$ - und  $O(N)$ -symmetrischer Modelle mit  $N$  Komponenten [Rei95b] auf diese Weise verbessern läßt.

Grundlage der Untersuchungen waren Programme, die von T. Reisz geschrieben wurden. Mit diesen Programmen kann die LCE der 1PI-Suszeptibilitäten zu hoher Ordnung berechnet werden. Die Ordnung ist begrenzt durch die Daten der Graphen, die vorab für jedes Modell berechnet werden. Der Zeitaufwand zur Berechnung dieser Daten steigt um einen Faktor von 30–40 steigt, wenn man die Ordnung um 2 erhöht [Rei95a]. Die Programme greifen auf diese Daten zu, berechnen also nicht die graphische Entwicklung für jede Berechnung neu. In dieser Arbeit wurden dreidimensionale Modelle untersucht. Die wichtigen Parameter waren der Hopping-Parameter  $\kappa$  und die  $(\phi^2 - 1)^2$ -Kopplung  $\lambda$ .

Mit Hilfe dieser Programme wurden in [Rei95b] kritische Exponenten für  $\mathbb{Z}_2$ - bzw.  $O(N)$ -symmetrische Modelle mit  $N = 1, 2, 3, 4$  und Dimensionen  $d = 3, 4$  berechnet. In drei Dimensionen lag die relative Genauigkeit bei der Bestimmung des

kritischen Exponenten  $\nu$  dabei zwischen 0.29% für  $N = 1$  und 0.92% für  $N = 4$ . Kritische Exponenten werden auch mit Hilfe von Monte-Carlo-Verfahren in Kombination mit Renormierungsgruppenmethoden ebenfalls mit hoher Genauigkeit bestimmt. So werden von den Autoren Genauigkeiten von 0.08% [HPV98] bzw. 0.16% [BFMM<sup>+</sup>99] für das Modell mit einer Komponente und 0.16 % [HT99] für das Modell mit zwei Komponenten angegeben. Experimentell erreicht man für das Modell mit einer Komponente Genauigkeiten von 0.5-1.0% und für das Modell mit zwei Komponenten 0.02% [LSN<sup>+</sup>96]. Das Experiment ist für  $N = 2$  also eine Größenordnung genauer als die theoretisch berechneten Werte.

Nach der Zusammenfassung der Grundlagen der LCE wurden in dieser Arbeit die Renormierungsgruppentransformationen für die Suszeptibilitäten hergeleitet (Kapitel 4 und Anhang C). Dieses Projekt basiert auf Rechnungen von A. Pordt und T. Reisz. Gegenüber den ursprünglichen Rechnungen gibt es Änderungen an der Skalenrelation der gewichteten Suszeptibilität  $\mu_2$  und an der homomorphen Interpolation der Skalenrelationen. Mit Hilfe der Skalenrelationen ist die numerische Bestimmung der RG-Flüsse der nackten Kopplungen  $\kappa$  und  $\lambda$  möglich.

Die numerische Untersuchung dieser Flüsse machte den größten Teil der Arbeit aus. Dabei zeigte sich, daß das Verfahren in der vorgeschlagenen Form bei der Berechnung des kritischen Exponenten  $\nu$  noch keine gute Genauigkeit im Vergleich zu anderen Methoden erreicht. Der gefundene kritische Exponent für das Modell mit einer Komponente  $\nu = 0.595(20)$  weicht 5.6% von den experimentellen Ergebnissen ab. Der Fluß von nur zwei Kopplungen ermöglicht also keine gute Bestimmung des kritischen Exponenten. Bei  $N = 2$  hat das Ergebnis  $\nu = 0.62(5)$  aufgrund der niedrigeren Ordnung der Reihenentwicklung eine größere Ungenauigkeit. Es weicht um 7.5% von den experimentellen Werten ab.

Vergleicht man nach diesen Erkenntnissen die untersuchte Methode mit den ersten Versuchen der Monte-Carlo Renormierungsgruppe [kM76], so erkennt man gewisse Parallelen beim Aufwand und der Genauigkeit. Dort wurde für das Ising-Modell in zwei Dimensionen die Ableitungsmatrix für die RG-Abbildung der Kopplung nächster und übernächster Nachbarn sowie der Vierpunkt-Kopplung bestimmt. Der größte Eigenwert ergibt den kritischen Exponent  $\nu$ . Die Genauigkeit bei diesem Verfahren betrug zwischen 4 und 10%.

Die Vorteile des untersuchten Verfahrens ist die schnelle Berechenbarkeit von RG-Flüssen mit stetig variierbaren Blockgrößen  $0 < L \leq 2$ . Flußbilder können für einen großen Parameterbereich in kurzer Zeit erzeugt werden. Ebenso ist die Bestimmung der Ableitungsmatrix der RG-Transformation sehr schnell möglich. Man benötigt nur zwischen 5 und 30 Minuten Rechenzeit auf einem Pentium II mit 400 MHz, wenn man die Lage des RG-Fixpunktes kennt. Inklusive der Bestimmung des Fixpunktes kommt man mit etwa 2h Rechenzeit aus.

Hasenbusch und Török schreiben, daß die Gesamtrechenzeit zur Bestimmung des

kritischen Exponenten des Modells mit 2 Komponenten insgesamt 3 Jahre auf 200 MHz Pentium Pro PCs war [HT99]. Es wäre schon bemerkenswert, wenn man mit so viel weniger Aufwand an Rechenzeit ein ähnlich gutes Ergebnis wie diese Autoren erzielen könnte.

Der Fluß von nur zwei Kopplungen ermöglicht also keine sehr genaue Bestimmung des kritischen Exponenten  $\nu$ . Für konservative Verbesserungen des untersuchten Verfahrens muß eine verbesserte LCE entwickelt werden, die auch andere Kopplungen als solche nächster Nachbarn berücksichtigt. Dies ist aber ein neues Forschungsprojekt, da man dazu die Untersuchungen aus [Rei95a] für diese neue LCE durchführen muß. Ferner wäre die Erhöhung der Ordnung der LCE sehr wünschenswert. Beide Verbesserungen zusammen erhöhen allerdings den Aufwand bei der Erzeugung der Graphen der Entwicklung deutlich. Es wäre daher im Vorfeld zu untersuchen, wie weit man die Genauigkeit durch Verwendung eines höherdimensionalen Flusses verbessern kann. Die Erfahrung der Monte-Carlo-Methode hat gezeigt, daß auf diese Weise die Genauigkeit nicht besonders weit gesteigert werden kann [Pin99]. Dies muß im Rahmen der LCE in Kombination mit der Renormierungsgruppe aber neu untersucht werden.

Davon unabhängig wäre zur Bestimmung des kritischen Exponenten  $\eta$  eine nichtlineare RG-Transformation zu benutzen, bei der man nicht auf die Festlegung eines freien Parameters angewiesen ist. Die Berechnung der Skalenrelationen der Suszeptibilitäten einer solche Transformation ist natürlich aufwendiger, als die Berechnung der Skalenrelationen für eine lineare RG-Transformation.



# ANHANG A

---

## Maße auf Funktionenräumen

---

Für die maßtheoretische Behandlung von Gittertheorien und erst recht von Kontinuumstheorien benötigt man etwas mathematischen Aufwand. Die Grundbegriffe der Theorie kann man z.B. [Sch96, Bau91] entnehmen. Hier werden einige Begriffe zusammengestellt.

Der Inhalt dieses Anhangs geht z.T. auf folgende Quellen zurück: [Sch96, Gro88, GJ87, MTV99, Kuo75, Bau91]

## A.1 Grundbegriffe der Maßtheorie

**Definition A.1 ( $\sigma$ -Algebra, meßbarer Raum)** Es sei  $\Omega \neq \emptyset$  und  $S \subset \mathcal{P}(\Omega)$  eine Untermenge der Potenzmenge von  $\Omega$ .  $S$  heißt  $\sigma$ -Algebra oder  $\sigma$ -Körper, wenn

- a)  $S$  eine Mengenalgebra ist, also  $\Omega$  enthält, Komplementbildung erlaubt ( $A \in S \Rightarrow A^c \in S$ ) und Vereinigungen erlaubt ( $A, B \in S \Rightarrow A \cup B \in S$ )
- b)  $S$  abzählbare Vereinigungen erlaubt, d.h. mit jeder Folge  $(A_n)_{n \in \mathbb{N}}$  in  $S$  liegt auch  $\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n$  in  $S$ .

Ein Paar  $(\Omega, S)$  mit  $\Omega \neq \emptyset$ ,  $S$  eine  $\sigma$ -Algebra über  $\Omega$  heißt meßbarer Raum, die Elemente von  $S$  heißen meßbare Mengen.

Gibt man eine Teilmenge der Potenzmenge  $\mathcal{P}(\Omega)$  vor, so gibt es eine kleinste  $\sigma$ -Algebra, die diese Teilmenge umfaßt. Als *Borelsche  $\sigma$ -Algebra* eines topologischen Raumes bezeichnet man die  $\sigma$ -Algebra, die von allen offenen Mengen erzeugt wird. Im Falle des  $\mathbb{R}^n$  bezeichnet man die zugehörige  $\sigma$ -Algebra mit  $\mathbb{B}^n$ .

Eine Abbildung  $\varphi : \mathcal{E} \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$  von einer Teilmenge der Potenzmenge  $\mathcal{P}(\Omega)$  nach  $\bar{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  heißt  $\sigma$ -additiv wenn für jede Folge  $(A_n)_{n \in \mathbb{N}}$  in  $\mathcal{E}$  paarweise fremder Mengen ( $A_n \cap A_m = \emptyset$  für  $n \neq m$ ), deren Vereinigung  $\bigcup_{n=0}^{\infty} A_n$  in  $\mathcal{E}$  liegt, die Reihe  $\sum_{n=0}^{\infty} \varphi(A_n)$  unabhängig von der Summationsreihenfolge konvergiert und  $\sum_{n=0}^{\infty} \varphi(A_n) = \varphi(\bigcup_{n=0}^{\infty} A_n)$  gilt.

**Definition A.2 (Maß)** Sei  $S$  eine  $\sigma$ -Algebra über  $\Omega$ .  $\mu : S \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$  heißt

- a) Maß, wenn  $\mu$  nicht-negativ und  $\sigma$ -additiv ist, sowie  $\mu(\emptyset) = 0$ . Das Tripel  $(\Omega, S, \mu)$  heißt dann Maßraum.
- b) Wahrscheinlichkeitsmaß, wenn  $\mu$  ein Maß ist und  $\mu(\Omega) = 1$  gilt. Das Tripel  $(\Omega, S, \mu)$  heißt dann Wahrscheinlichkeitsraum, die Elemente  $\omega \in \Omega$  heißen Ergebnisse und die Elemente von  $S$  heißen Ereignisse.

Man sagt, eine Aussage, die für jedes  $\omega \in \Omega$  definiert ist, gelte  $\mu$ -fast-überall, wenn es eine Menge  $N \in S$  mit  $\mu(N) = 0$  gibt, so daß die Aussage für alle  $\omega \in N^c$  zutrifft. Abgekürzt schreibt man  $\mu$ -f.ü., und für Wahrscheinlichkeitsmaße sagt man  $\mu$ -fast-sicher und kürzt dies mit  $\mu$ -f.s. ab.

**Definition A.3 (Meßbare Abbildung)** Seien  $(\Omega, S)$  und  $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$  meßbare Räume und  $X : \Omega \rightarrow \mathcal{X}$  eine Abbildung.  $X$  heißt  $(S, \mathcal{B})$ -meßbar, wenn  $X^{-1}(\mathcal{B}) \subset S$ .

**Satz A.1 (Induziertes Maß)** Sei  $X : (\Omega, S) \rightarrow (\mathcal{X}, \mathcal{B})$  meßbar. Ferner sei  $\mu$  ein Maß auf  $S$ . Dann wird durch  $\mu^X(B) := \mu(X^{-1}(B))$ ,  $B \in \mathcal{B}$  ein Maß  $\mu^X$  auf  $\mathcal{B}$  definiert. Für dieses Maß gilt  $\mu^X(\mathcal{X}) = \mu(\Omega)$ . Man schreibt dann auch  $X : (\Omega, S, \mu) \rightarrow (\mathcal{X}, \mathcal{B}, \mu^X)$ .

#### Definition A.4 (Zufallsgröße)

Es seien  $(\Omega, S, \mu)$  ein Wahrscheinlichkeitsraum und  $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$  ein meßbarer Raum.

- a) Ist  $X : \Omega \rightarrow \mathcal{X}$   $(S, \mathcal{B})$ -meßbar, so heißt  $X$  Zufallsgröße mit Werten in  $\mathcal{X}$ .
- b) Für eine Zufallsgröße heißt das induzierte Maß  $P^X$  die Verteilung von  $X$
- c) Für Zufallsgrößen „mit Werten in  $\mathbb{R}$ “ lässt man den Zusatz fort und für Zufallsgrößen „mit Werten in  $\mathbb{R}^n$ “ sagt man auch Zufallsvektoren.

#### Definition A.5 (Stochastischer Prozeß)

Ist ein Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, S, P)$  und eine Indexmenge  $I$  gegeben, so daß für jedes  $i \in I$  eine Zufallsgröße

$$X_i : (\Omega, S, P) \rightarrow (\mathcal{X}_i, \mathcal{B}_i, P^{X_i})$$

definiert ist, so heißt

$$X_I := (\Omega, S, P, (X_i)_{i \in I})$$

ein stochastischer Prozeß mit der Parametermenge  $I$ . Ist der Bildraum für alle  $i \in I$  der gleiche, d.h.

$$\forall i \in I : (\mathcal{X}_i, \mathcal{B}_i) = (\mathcal{X}, \mathcal{B}),$$

so heißt  $X_I$  ein stochastischer Prozeß mit dem Zustandsraum  $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ . Gilt

$$(\mathcal{X}, \mathcal{B}) = (\mathbb{R}^n, \mathbb{B}^n)$$

mit der Borelschen  $\sigma$ -Algebra zu  $\mathbb{R}^n$ , so sagt man schließlich  $X_I$  sei ein  $n$ -dimensionaler stochastischer Prozeß.

Man stellt sich häufig unter der Indexmenge  $I$  eine Zeitvariable vor, dies ist aber nicht notwendig. Für die Feldtheorie benötigt man  $I = \mathbb{R}^d$ .

**Definition A.6 (Zufallsfunktionen)**  $X_I$  sei ein stochastischer Prozeß mit dem Zustandsraum  $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ . Die Pfade des Prozesses  $X_I$  sind die Abbildungen  $X^\omega$ ,  $\omega \in \Omega$ , definiert durch

$$\begin{aligned} X^\omega : I &\rightarrow \mathcal{X} \\ i &\mapsto X^\omega(i) := X_i(\omega). \end{aligned}$$

Man kann einen stochastischen Prozeß also als Zufallsgröße

$$X_I : (\Omega, \mathcal{S}, P) \rightarrow (\mathcal{X}^I, \mathcal{B}^I, P^X)$$

auffassen. Im Falle von  $I = T \subset \mathbb{R}$  und  $\mathcal{X} = \mathbb{R}$  ist  $X^\omega$  wirklich ein Zufallspfad, der die „zeitliche“ Entwicklung des Systems beschreibt, das zu  $\omega$  gehört. Entsprechend kann man stochastische Prozesse mit  $I = \Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ , d.h. eine Gittertheorie bzw.  $I = \mathbb{R}^d$  für eine Theorie von Zufallsfunktionen auf dem  $\mathbb{R}^d$  betrachten. In allen Fällen ist  $P^X$  das gesuchte Pfadintegralmaß. Die Mathematik stellt also in der Tat bereits ein Konstrukt bereit, daß für die Beschreibung der physikalischen Vorgänge geeignet ist.

Die Aufgabe der Physik besteht nun darin, geeignete Räume und Abbildungen festzulegen und solche Maße zu konstruieren. Man kann sich dann fragen, welche analytischen Eigenschaften diese Funktionen im Mittel haben und sich dem Problem der konkreten und effizienten Berechnung der im Rahmen dieser Prozesse interessierenden Größen zuwenden.

## A.2 Operatorkerne und stochastische Prozesse

Zunächst muß man dazu aber noch etwas mehr über die Maße und ihre Anwendung verstehen. Eine wichtige Methode zur Konstruktion stochastischer Prozesse ist die Betrachtung von Kernen und Halbgruppen von Kernen. Das prominente Beispiel hierfür ist der Wiener-Prozeß, mit dem man die Brownsche Molekularbewegung modelliert<sup>1</sup>. Dies hängt eng mit der ersten Idee von Feynman zusammen. In der Quantenmechanik ist die Schrödingergleichung

$$i\partial_t \psi(x, t) = H\psi(x, t)$$

zu lösen. Dies geht (zunächst formal) mit dem Zeitentwicklungsoperator  $e^{-itH}$ , der aus der vorgegebenen Wellenfunktion  $\psi_0(x)$  zur Zeit  $t = 0$  die Wellenfunktion zur Zeit  $t$  erzeugt:

$$\psi(x, t) = e^{-itH}\psi_0(x)$$

Man sucht nun eine Formel, um den Operatorkern des Zeitentwicklungsoperators  $e^{-itH}$  zu berechnen. Nach Wick-Rotation der Zeit ( $t \mapsto -it$ , bzw.  $\tau = it$ ) lautet das Problem, den Operatorkern zu  $e^{-\tau H}$  zu finden (Im folgenden wird  $t$  auch für die Wick-rotierte Zeit verwendet.).

---

<sup>1</sup> Beim Wiener-Prozeß stellt sich heraus, daß die Pfade zwar  $P$ -f.s. stetig sind, aber nicht differenzierbar. Es gibt alternative Prozesse, wie den Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß, die aus physikalischen Gründen besser für eine Modellierung geeignet sind.

Man sucht damit für jeden Zeitpunkt eine Distribution  $\mathcal{K}_t(x, y)$  mit

$$(e^{-tH}\psi)(x) = \int \mathcal{K}_t(x, y)\psi(y)dy ,$$

die  $\psi$  den Wert  $(e^{-tH}\psi)(x)$  zuordnet. In der Quantenmechanik hat man  $H = \frac{1}{2}P^2 + V(X)$  mit dem Impulsoperator  $P = \frac{1}{i}\partial_x$  und dem Multiplikations-Ortsoperator  $X$  in der Ortsraumdarstellung. Für freie Teilchen ist  $V = 0$  und  $e^{-tH} = e^{t\partial_x^2}$ , und man erhält die **Lösung der Wärmeleitungsgleichung**

$$\boxed{\partial_t u(t, x) = -Hu(t, x) = \frac{1}{2}\partial_x^2 u(x, t)} \quad (\text{A.1})$$

mit dem Startwert  $u(0, x) = u_0(x)$  durch

$$\boxed{u(t, x) = e^{-tH}u_0(x) = \int \mathcal{K}_t(x, y)u_0(y)dy .} \quad (\text{A.2})$$

Der Kern ist durch die folgende Gaußsche Dichte gegeben, was man in diesem einfachen Fall per Fouriertransformation ausrechnen kann:

$$\mathcal{K}_t(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}}e^{-\frac{1}{2t}|x-y|^2}$$

Der Kern  $K_t(x, y)$  ist positiv und normiert ( $\int \mathcal{K}_t(x, y)dy = 1$ ) und es gilt

$$\mathcal{K}_{t+s}(x, y) = \int \mathcal{K}_t(x, z)\mathcal{K}_s(z, y)dz ,$$

wie man leicht nachrechnet. Dies ist die Halbgruppeneigenschaft von  $\mathcal{K}$ , die  $\mathcal{K}$  vom Operator  $e^{-tH}$  „erbt“. Die analoge Eigenschaft quantenmechanischer Erwartungswerte hat bei Feynman zur Pfadintegraldarstellung geführt:

$$\langle x|e^{-i(t+s)H}|y\rangle = \langle x| \left( \int e^{-itH}|z\rangle\langle z|e^{-isH}dz \right) |y\rangle$$

Durch immer feinere Unterteilung des Intervalls erhält man formal das Pfadintegral der Quantenmechanik für den Operatorkern von  $e^{-itH}$ . Man beachte, daß bereits der Operatorkern für ein freies Teilchen nur als Grenzwert eines Fresnel-Integrals berechnet werden kann, man muß also der Zeit einen geeigneten Imaginärteil hinzufügen.

In der Mathematik bezeichnet man weniger singuläre Objekte als Kerne, weil nicht immer solche Dichten verfügbar sind. Im mathematischen Sinne ist  $\mathcal{K}$  die Dichte eines Kerns:

**Definition A.7 (Kern)** Seien  $(\Omega, S)$  und  $(\Omega', S')$  zwei Maßräume. Eine Funktion

$$K : \Omega \times S' \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} \cup \{\infty\}$$

heißt dann ein Kern von  $(\Omega, S)$  nach  $(\Omega', S')$ , wenn sie folgende zwei Eigenschaften besitzt:

$$\begin{aligned}\omega &\mapsto K(\omega, s') \text{ ist } S\text{-meßbar für alle } s' \in S' \\ s' &\mapsto K(\omega, s') \text{ ist ein Maß auf } S' \text{ für jedes } \omega \in \Omega\end{aligned}$$

Ein Kern heißt Markovsch, bzw. sub-Markovsch, wenn

$$\forall \omega \in \Omega : K(\omega, \Omega') = 1 \text{ bzw. } \leq 1.$$

Ist  $(\Omega, S) = (\Omega', S')$ , so spricht man von einem Kern auf  $(\Omega, S)$  oder kurz von einem Kern auf  $\Omega$ .

Sei  $K$  ein Kern auf  $(\Omega, S)$ .  $K(\omega, \cdot)$  definiert ein von  $\omega$  abhängiges Maß auf  $S$ . Man nennt Kerne auf  $(\Omega, S)$  deswegen auch *Zufallsmaße über*  $(\Omega, S)$ .

Um den Anschluß an die physikalische Situation zu bekommen, geht man von einem Dirac-Maß  $\delta_x$  auf der Borelschen  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{B}$  von  $\mathbb{R}$  mit

$$\delta_x(S) = \begin{cases} 1 & x \in S \\ 0 & x \notin S \end{cases}.$$

aus. Das Maß hat die formalen Dichte  $\delta(x - y)$ . Dann hat man

$$e^{-tH} \delta(x - z) = \int \mathcal{K}_t(x, y) \delta(y - z) dy = \mathcal{K}_t(x, z).$$

Das Dirac-Maß mit Zentrum bei  $z$  ist also nach Ablauf der Zeit  $t$  zu einem Gauß-Maß mit der Dichte  $\mathcal{K}_t(x, z)$  geworden. Zur Dichte  $\mathcal{K}_t(x, y)$  hat man damit für jedes  $t$  einen Kern  $\mathcal{K}_t$  auf  $\mathbb{R} \times \mathcal{B}$  mit

$$\mathcal{K}_t(x, B) = \int_B \mathcal{K}_t(x, y) dy.$$

Man kann so die Frage beantworten, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, das Teilchen zur Zeit  $t$  im Intervall  $I$  oder allgemein in einer Borel-Menge  $B$  von  $\mathbb{R}$  zu finden.

Man kann sich jetzt die Frage stellen, wie die Wahrscheinlichkeit ist, daß bei einem Wiener-Prozeß ein Teilchen, das bei  $t_0 = 0$  an der Stelle  $x$  startet zur Zeit  $t$  im Intervall  $I$  befindet und dann zur Zeit  $t+s$  bei  $y$  ankommt. Diese Wahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$\int_I \mathcal{K}_t(x, z) \mathcal{K}_s(z, y) dz.$$

In solchen Betrachtungen liegt auch der Schlüssel für die Definition von stochastischen Prozessen.

### A.3 Projektiver Limes von Maßen

**Definition A.8 (Zylindermengen)** Es seien  $\Omega_1$  und  $\Omega_2$  nichtleere Mengen

- a)  $\Omega := \Omega_1 \times \Omega_2 := \{\omega = (\omega_1, \omega_2) | \omega_1 \in \Omega_1 \wedge \omega_2 \in \Omega_2\}$  heißt kartesisches Produkt von  $\Omega_1$  und  $\Omega_2$ .
- b) Mengen der Form  $A_1 \times A_2$  mit  $A_i \in \Omega_i, i = 1, 2$  heißen Rechteckmengen.  $A_i$  heißen Seiten der Rechteckmenge.
- c) Rechteckmengen der Form  $\Omega_1 \times A_2$  bzw.  $A_1 \times \Omega_2$  heißen Zylindermengen.

Jedes  $\omega := (\omega_1, \omega_2) \in \Omega_1 \times \Omega_2$  definiert eine Abbildung  $\omega : \{1, 2\} \rightarrow \Omega_1 \cup \Omega_2$  durch

$$\omega(i) = \omega_i$$

Man kann das kartesische Produkt daher auch als die Menge aller Abbildungen von der Indexmenge  $\{1, 2\}$  in die Vereinigung von  $\Omega_1$  und  $\Omega_2$  auffassen,

$$\Omega_1 \times \Omega_2 = \{\omega | \omega : \{1, 2\} \rightarrow \Omega_1 \cup \Omega_2; \omega_i \in \Omega_i\}$$

Dieser Begriff ist auf beliebige Indexmengen erweiterbar.

**Definition A.9 (Kartesisches Produkt, Zylindermengen)**

Es sei  $I$  eine Menge und für jedes  $i \in I$  sei eine Menge  $\Omega_i$  gegeben.

a)

$$\prod_{i \in I} \Omega_i := \times_{i \in I} \Omega_i := \{w : I \rightarrow \bigcup_{i \in I} \Omega_i | \forall i \in I : w(i) \in \Omega_i\}$$

heißt das kartesische Produkt der  $\Omega_i, i \in I$ .

- b) Es sei  $J \subseteq I$  eine endliche Teilmenge von  $I$  ( $|J| < \infty$ ). Für jedes  $j \in J$  sei eine Menge  $A_j \subset \Omega_j$  gegeben.

$$\{\omega \in \prod_{i \in I} \Omega_i | \forall j \in J : \omega(j) \in A_j\}$$

heißt eine (endlich-dimensionale) Zylindermenge mit der Basis  $\prod_{j \in J} A_j$ .

- c) Ist  $\forall i \in I : \Omega_i = \Omega$ , so ist

$$\Omega^I := \prod_{i \in I} \Omega = \{\omega : I \rightarrow \Omega\} .$$

d) Sei  $J \subset K \subset I$ , dann hat man durch Einschränkung der Abbildungen  $\omega \in \prod_{i \in I} \Omega_i$  auf  $J$  eine Abbildung

$$p_J^I : \prod_{i \in I} \Omega_i \rightarrow \prod_{j \in J} \Omega_j .$$

Für diese (Projektions-) Abbildungen gilt

$$p_J^L = p_J^K \circ p_K^L .$$

#### Definition A.10 (Produkt- $\sigma$ -Algebra)

Es sei  $I$  eine Menge und  $(\Omega_i, S_i), i \in I$  seien meßbare Räume. Dann heißt die kleinste  $\sigma$ -Algebra, bzgl. der alle Projektionsabbildungen  $p_i : \prod_{l \in I} \Omega_l \rightarrow \Omega_i$  meßbar sind  $\bigotimes_{i \in I} S_i$ .

#### Definition A.11 (Polnischer Raum)

Ein topologischer Raum heißt polnisch, wenn es eine seine Topologie definierende, vollständige Metrik gibt und wenn diese Topologie eine abzählbare Basis besitzt.

#### Definition A.12 (Projektive Familie von W-Maßen)

Eine Familie  $(P_J)_{J \in \mathcal{H}(I)}$  von W-Maßen auf den meßbaren Räumen  $(E^J, \mathcal{B}^J)$  heißt projektiv, wenn für sie die Beziehung

$$P_J = p_J^H(P_H)$$

für je zwei Mengen  $J, H \in \mathcal{H}(I)$  mit  $J \subset H$  besteht.

**Satz A.2 (Satz von Kolmogorov)** Ist  $E$  ein polnischer Raum und  $I$  eine nichtleere Menge, so existiert zu jeder projektiven Familie  $(P_J)_{J \in \mathcal{H}(I)}$  von Wahrscheinlichkeitsmaßen über  $E$  genau ein W-Maß  $P_I$  auf  $(E^I, \mathcal{B}^I)$  mit

$$\forall J \in \mathcal{H}(I) : p_J(P_I) = P_J .$$

Man nennt  $P_I$  den projektiven Limes der Familie  $(P_J)_{J \in \mathcal{H}(I)}$  und schreibt

$$\lim_{\substack{\longleftarrow \\ J \in \mathcal{H}}} P_J := \lim_{\substack{\longleftarrow \\ J \in \mathcal{H}}} P_J := P_I .$$

**Korollar A.1** Ist  $E$  ein polnischer Raum und  $I$  eine beliebige nichtleere Menge, so existiert zu jeder projektiven Familie  $(P_J)_{J \in \mathcal{H}(I)}$  von W-Maßen über  $E$  ein stochastischer Prozeß mit Zustandsraum  $E$  und Parametermenge  $I$  derart, daß  $(P_J)_{J \in \mathcal{H}(I)}$  die Familie seiner endlich-dimensionalen Verteilungen ist.

Beweise hierzu findet man z.B. in [Bau91].

Für die Konstruktion von Maßen stochastischer Prozesse von Zufallsfunktionen reicht dies aus. Im Rahmen der QFT benötigt man eine noch allgemeinere Begriffsbildung.

## A.4 Maße auf Hilberträumen

Zunächst seien einige Resultate für Maße auf Hilberträumen zusammengefaßt. Die Situation, die man in der QFT betrachten muß, ist aber noch ein wenig komplexer, weil man ein Paar bestehend aus einem Funktionenraum und dem dazugehörigen Distributionenraum betrachten muß.

Sei also  $H$  ein reeller separabler<sup>2</sup> Hilbertraum.  $\mathcal{B}$  sei die Borelsche  $\sigma$ -Algebra in  $H$ , die von den offenen Mengen von  $H$  erzeugt wird. Ein Borel-Maß auf  $H$  ist ein Maß auf  $(H, \mathcal{B})$ , das für kompakte Mengen endlich ist.

**Definition A.13 (Mittel)** *Sei  $\mu$  ein Borel-Maß auf  $H$ . Das Mittel  $m_\mu$  von  $\mu$  ist ein Element des Hilbertraumes  $H$ , so daß*

$$\langle m_\mu, f \rangle = \int \langle h, f \rangle d\mu(h)$$

mit  $f \in H$ .

Im allgemeinen existiert das Mittel eines Maßes nicht.

**Definition A.14 (Kovarianzoperator)** *Sei  $\mu$  ein Borel-Maß auf  $H$ . Der Kovarianzoperator  $C_\mu$  von  $\mu$  ist definiert durch*

$$\langle C_\mu f, g \rangle = \int_H \langle f, h \rangle \langle g, h \rangle d\mu(h)$$

mit  $f, g \in H$ .

$C_\mu$  braucht nicht zu existieren, aber wenn er existiert, ist er positiv und selbstadjungiert.

**Beispiel A.1** Bei dem eindimensionalen Gaußmaß auf  $\mathbb{R}$  mit Dichtefunktion

$$f_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)$$

mit (Ko-)Varianz  $\sigma \in \mathbb{R}_{>0}$  hat man

$$\int (xz)(yz)f_\sigma(z)dz = xy \int z^2 f_\sigma(z)dz = \sigma xy.$$

---

<sup>2</sup> D.h., es gibt eine abzählbar dichte Untermenge von  $H$  oder die Dimension des Hilbertraumes ist höchstens abzählbar.

**Beispiel A.2 (Heuristisch)** In der Physik arbeitet man meist mit dem Integralkern des Kovarianzoperators  $C$  und bezeichnet diesen als Propagator im Sinne von

$$(-\Delta + m^2)C(x, y) = \delta(x - y)$$

bzw.

$$(Cf)(x) = \int C(x, y)f(y)dy .$$

Dann ist

$$\langle Cf, g \rangle_{\mu} = \frac{1}{Z} \int \langle f, h \rangle \langle g, h \rangle e^{-\frac{1}{2}\langle h, Ch \rangle} \mathcal{D}h$$

also

$$C(x, y)_{\mu} = \frac{1}{Z} \int h(x)h(y)e^{-\frac{1}{2}\langle h, Ch \rangle} \mathcal{D}h = \langle h(x)h(y) \rangle_{\mu}$$

Dies erhält man auch aus dem Wick-Theorem.

### Definition A.15 (Charakteristisches Funktional)

Das charakteristische Funktional  $\hat{\mu}$  eines Borel-Maßes  $\mu$  auf  $H$  ist definiert durch

$$\hat{\mu}(f) := \int_H e^{i\langle f, h \rangle} d\mu(h)$$

für  $f \in H$ .

Im allgemeinen existiert  $\hat{\mu}$  nicht. Für endliche Maße und insbesondere Wahrscheinlichkeitsmaße auf  $H$  mit  $\mu(H) < \infty$  existiert  $\hat{\mu}$  aber und es gilt  $|\hat{\mu}(f)| \leq \mu(H) \forall f \in H$ . Für den Fall eines Wahrscheinlichkeitsmaßes ist  $\hat{\mu}$  ein positiv definites Funktional und  $\hat{\mu}(0) = 1$ .

In der euklidischen QFT betrachtet man das erzeugende Funktional  $Z$

$$Z(J) = \hat{\mu}(iJ) .$$

**Definition A.16 (Gauß-Maße)** Ein Gauß-Maß  $\mu$  in  $H$  ist ein Borel-Maß auf  $H$ , so daß für jedes  $f \in H$  die messbare Funktion  $\langle f, \cdot \rangle$  auf  $H$  normalverteilt ist, d.h. es gibt reelle Zahlen  $m_f$  und  $\sigma_f$ , so daß

$$\mu(\{g \in H | \langle f, g \rangle \leq a\}) = \int_{-\infty}^a \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_f}} e^{-\frac{(t-m_f)^2}{2\sigma_f^2}} dt$$

Ist  $\mu$  ein Gauß-Maß auf  $H$ , so ist das charakteristische Funktional gegeben durch

$$\hat{\mu}(f) = e^{i\langle m_{\mu}, f \rangle - \frac{1}{2}\langle S_{\mu}f, f \rangle} ,$$

wenn sowohl  $S_{\mu}$  der Kovarianzoperator als auch das Mittel  $m_{\mu}$  existieren. Da man ferner für zwei Borel-Maße  $\mu, \nu$  mit  $\hat{\mu} = \hat{\nu}$  zeigen kann, daß  $\mu = \nu$  ist, sind Gauß-Maße also durch Kovarianzoperator und Mittel eindeutig bestimmt.

**Satz A.3 (Einheits-Gaußmaß existiert nicht)**

Ist  $\dim H = \infty$ , so existiert kein Borel-Maß  $\mu$  in  $H$  mit

$$\hat{\mu}(f) = e^{-\frac{1}{2}\|f\|^2}.$$

Beweis z.B. in [Kuo75], Corollar zu Theorem 2.2. Jeder Kovarianzoperator eines Gauß-Maßes ist in der Situation dieses Abschnittes ein Spurklasseoperator. Der Einheitsoperator ist in dieser Situation aber kein Spurklasseoperator.

## A.5 Maße auf Banachräumen

Im Rahmen der Quantenfeldtheorie wird man durch die geforderten Grundgleichungen darauf geführt, Distributionen zu betrachten. Distributionen sind linear-stetige Funktionale über einem metrischen Raum. Diese Situation soll in diesem Abschnitt besprochen werden. Der metrische Raum ist ein Raum von Funktionen und die Distributionen sind der Dualraum dazu.

In der Physik sagt man dann auch, daß die Distributionen = „Quantenfelder“ durch Testfunktionen „ausgeschmiert“ werden. Die Funktionen beschreiben Meßapparaturen. In physikalischer Sprechweise sorgt die Differenzierbarkeit der Testfunktionen für UV-Regularität und der schnelle Abfall für IR-Regularität.

Ein Banachraum  $B$  ist ein vollständiger, normierter  $\mathbb{R}$ - oder  $\mathbb{C}$ -Vektorraum. Als Dualraum  $B'$  eines ( $\mathbb{R}$  oder  $\mathbb{C}$ ) Banachraumes  $B$  bezeichnet man die Menge aller linear-stetigen Funktionale auf  $B$ , d.h. der linear-stetigen Abbildungen nach  $\mathbb{R}$  bzw.  $\mathbb{C}$ .

Der Dualraum ist selbst wieder ein Banachraum. Er bekommt die Vektorraumstruktur durch

$$\begin{aligned} (\phi_1 + \phi_2)(f) &:= \phi_1(f) + \phi_2(f) \\ (a\phi)(f) &:= \bar{a}\phi(f). \end{aligned}$$

Für endlichdimensionale euklidische oder hermitesche Vektorräume  $V$  ist der Dualraum  $V'$  isomorph zu  $V$  und man kann jedes Element aus  $V'$  durch das Skalarprodukt auf  $V$  ausdrücken:

$$v' = \langle v, \cdot \rangle$$

für ein  $v \in V$ . In Hilberträumen  $H$  gibt es einen Satz von F. RIESZ, der das gleiche aussagt. Hieran erkennt man auch den Sinn der zweiten Gleichung bei der Definition des Dualraumes. Für  $\phi \in H'$  ist

$$\phi(f) = \langle \hat{\phi}, f \rangle$$

für ein  $\hat{\phi} \in H$ . Dann hat man

$$(a\phi)(f) = \bar{a}\phi(f) = \bar{a}\langle \hat{\phi}, f \rangle = \langle a\hat{\phi}, f \rangle$$

Für Banachräume  $B$  schließlich ist der Dualraum  $B'$  i.a. nicht isomorph zu  $B$ .

In der Physik spielen vor allem Räume unendlich oft differenzierbarer Funktionen eine Rolle. Zwei wichtige Räume sind der Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger

$$\mathcal{D}(\mathbb{R}^d) := C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$$

mit der Normfamilie  $\{\|\cdot\|_{i,j}\}$  definiert durch

$$\|f\|_{i,j} := \max_{x \in K_j} (|\partial_i f(x)|)$$

mit geschachtelten Kompakta  $K_j$ , und der Raum der schneller als jede Potenz von  $\frac{1}{|x|}$  abfallenden unendlich oft differenzierbaren reellwertigen Funktionen auf  $\mathbb{R}^n$ . Man definiert auf ihm  $q$ -Normen für  $q \in \mathbb{N}$  und  $m, k \in \mathbb{N}^n$  durch

$$\|f\|_k := \sup_{|m|, |k| \leq q} |x^m D^k f(x)|.$$

Dann ist

$$\mathcal{S} := \{f | f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \wedge \forall q \in \mathbb{N} : \|f\|_q < \infty\}.$$

(U.a. liegen beide Mengen dicht im Hilbertraum  $L_2(\mathbb{R}^n)$ .)

Der Raum  $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)'$  der linear-stetigen Funktionale auf  $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$  wird der Raum der Distributionen und der Raum  $\mathcal{S}'$  der linear-stetigen Funktionale  $\mathcal{S}$  der Raum der temperierten Distributionen genannt. Beide enthalten u.a. die  $\delta$ -Distribution und alle ihre Ableitungen.

Betrachtet man Maße auf Banachräumen, wobei hier speziell die Maße auf Distributionenräumen interessieren, so ändert sich die Situation, weil die Symmetrie zwischen Funktionen und linear-stetigen Funktionalen fortfällt.

Eine Möglichkeit, Maße auf Banachräumen zu definieren, ist das Bochner-Minlos-Theorem. Das Bochner-Theorem lautet

**Satz A.4 (Bochner)** *Sei  $\mu$  ein Wahrscheinlichkeits-Borel-Maß auf  $\mathbb{R}^N$ . Dann erfüllt die erzeugende Funktion*

$$\hat{\mu}(z) := \int_{\mathbb{R}^N} d\mu(x) e^{iz \cdot x}$$

*die folgenden drei Bedingungen:*

a) Normierung  $\hat{\mu}(0) = 1$

b)  $\hat{\mu}$  ist stetig auf  $\mathbb{R}^N$

c) Positivität:

$$f(x) := \sum_{j=1}^m c_j e^{iz_j \cdot x}, \Rightarrow \|f\|_\mu = \left( \int_{\mathbb{R}^N} |f(x)|^2 d\mu(x) \right)^{\frac{1}{2}} \geq 0$$

d.h.

$$\forall m \in \mathbb{N}, c_i \in \mathbb{C}, z_i \in \mathbb{R}^N : \sum_{i,j=1}^m \bar{c}_i c_j \hat{\mu}(z_i - z_j) \geq 0$$

Und es gilt umgekehrt: Erfüllt eine Funktion  $\hat{\mu} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  diese drei Bedingungen, so ist sie die erzeugende Funktion eines Wahrscheinlichkeits-Borel-Maßes.

Dieser Satz hat eine Verallgemeinerung auf unendlichdimensionale Räume. Man muß nun beachten, daß Funktionenraum und Dualraum i.a. nicht isomorph sind. Daher sind die Argumente der erzeugenden Funktion aus dem Dualraum des Raumes, auf dem das Maß definiert werden soll, dem Raum der (temperierten) Distributionen. Die erzeugende Funktion ist also ein Funktional auf dem Testfunktionenraum:

$$\hat{\mu}(f) = \int d\mu(\phi) e^{i\phi(f)}$$

**Satz A.5 (Bochner-Minlos)** [GJ87, Riv91] Erfüllt ein Funktional  $\hat{\mu} : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$  die Bedingungen aus Satz A.4 (Stetigkeit bzgl. der Topologie von  $\mathcal{S}$ ), so ist  $\hat{\mu}$  das erzeugende Funktional eines eindeutig bestimmten Borel-Wahrscheinlichkeitsmaßes auf  $\mathcal{S}'$ .

**F A.1 ([CI73, Riv91])**  $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$  ist eine abzählbare Vereinigung kompakter metrisierbarer Mengen  $K_n$ , auf denen die starke und die schwache Topologie von  $\mathcal{S}'$  übereinstimmen.



# ANHANG B

---

## Graphologie

---

Die Definitionen in diesem Anhang beziehen sich auf die graphische Darstellung der LCE und sind z.T. [Wor74] und [Rei95a] entnommen.

**Definition B.1 (Graphen)** Ein Graph ist eine Menge von Punkten (Vertices) und Kanten. Jede Kante ist mit zwei verschiedenen Vertices verbunden. Hat ein Vertex einen Bezeichner, so wird er externer Vertex genannt. Die übrigen Vertices heißen intern oder frei.

Die Wertigkeit eines Vertex ist die Anzahl der an ihm einlaufenden Kanten. Ein Vertex der Wertigkeit  $n$  wird  $n$ -wertig genannt.

Kann man jedes beliebige Paar von Vertices eines Graphen mit einer durchgehenden Folge von Kanten des Graphen verbinden, so nennt man den Graph zusammenhängend. Graphen, die nicht zusammenhängend sind, werden unzusammenhängend genannt.

Zwei Graphen mit  $n$  externen Vertices heißen isomorph, wenn es eine Abbildung gibt, die jeweils die äußeren Vertices, die inneren Vertices und die Kanten bijektiv aufeinander abbildet und dabei die Zusammenhänge des Graphen bewahrt. Die Anzahl der Isomorphismen eines Graphen auf sich selbst, bei festgehaltenen äußeren Vertices, heißt der Symmetriefaktor des Graphen. Eine Menge von Graphen ist topologisch verschieden, wenn keine zwei von ihnen isomorph sind.

**Definition B.2 (1-Vertex-irreduzible Graphen)** Ein Graph heißt 1-Vertex-irreduzibel (1VI), wenn nach der Entfernung eines beliebigen Vertex  $v$  zusammen mit

*den externen und internen Linien, die an ihm enden, jede der übrigen Zusammenhangskomponenten mindestens eine externe Linie enthält.*

*Zu jedem Graphen gehört genau ein 1VI-Graph, den man auch den zugehörigen Skelett-Graph nennt.*

*Die Zerlegung einer zusammenhängenden Graphen an einem Vertex  $v$  entspricht einer Umordnung der zugehörigen Terme der LCE. Man löst die Linien, die an  $v$  enden, von  $v$  ab. Dann bringt man alle Linien wieder an, die unzusammenhängenden Teilen gehören, die externe Vertices enthalten. Als letzten Schritt verbindet man die Enden der abgelösten Kanten. Diese so gebildeten Graphen nennt man 1-Einfügungen.*

# ANHANG C

---

## Skalenrelationen

---

Die Skalenrelation der gewichteten Suszeptibilitäten, die man für die Berechnung der Wellenfunktionsrenormierungskonstante  $Z_r$  benötigt, sind etwas aufwendiger zu berechnen.

Die  $O(N)$ -Tensorstruktur wird dabei wie in 2.3.2 abgespalten, so daß man ohne Einschränkung die Tensorindizes fortlassen kann.

Die Berechnung der Skalenrelationen und auch der Skalenrelationen der renormierten Kopplungen wird hier vorgestellt. Die Darstellung folgt [PR97b, Por97], enthält aber einige Änderungen, die für die Flußerzeugung wichtig sind.

### C.1 Die gewichtete Suszeptibilität $\mu_2$

In dieser Arbeit wird die Skalenrelation der gewichteten Suszeptibilität  $\mu_2$  benötigt.

$$\mu_2 = \sum_{x \in \Lambda} x^2 G_2^c(x, 0) = \frac{\partial^2}{\partial p_\nu \partial p^\nu} \sum_{x \in \Lambda} G_2^c(x, 0) e^{ip \cdot x} |_{p=0}$$

Nun soll

$$\mu'_2 = \sum_{x' \in \Lambda'} x'^2 G'^c_2(x', 0)$$

wieder durch die Suszeptibilitäten auf dem ungeblockten Gitter ausgedrückt werden. Die Skalenrelationen der zusammenhängenden Greenschen Funktionen sind bekannt

(4.10) und man erhält im ersten Schritt aus

$$\frac{1}{(\beta L^d)^2} \sum_{x_1 \in x'_1, x_2 \in x'_n} G_2^c(x_1, x_2) = G'^c_2(x'_1, x'_2) - \frac{1}{\alpha} \delta_{x'_1, x'_2}$$

$$\mu'_2 = \sum_{x' \in \Lambda'} x'^2 (G'^c_2(x', 0) + \frac{1}{\alpha} \delta_{x'_1, 0}) = \sum_{x' \in \Lambda'} x'^2 \frac{1}{(\beta L^d)^2} \sum_{x_1 \in x', x_2 \in 0'} G_2^c(x_1, x_2)$$

Der  $\delta_{x'_1, 0}$ -Term entfällt bei der Summation, da er nur für  $x' = 0$  einen Beitrag liefert, dann aber der Vorfaktor 0 ist.

Wir nehmen im Folgenden an, daß das Gitter  $\Lambda = \mathbb{Z}^d$  die Gitterkonstante 1 hat und das Gitter  $\Lambda' = (L\mathbb{Z})^d$  die Gitterkonstante  $L$ . Per Fouriertransformation auf  $\Lambda$  erhält man

$$(\beta L^d)^2 \mu'_2 = \int_{-\pi}^{\pi} \dots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \tilde{G}_c^2(k) \sum_{x' \in \Lambda'} x'^2 \sum_{x_1 \in x', x_2 \in 0'} e^{ik \cdot (x_1 - x_2)}$$

Wegen

$$\sum_{x \in x'} e^{ik \cdot x} = \prod_{i=1}^d \sum_{n_i=0}^{L-1} e^{ik_i(x'_i + n_i)} = \prod_{i=1}^d e^{ik_i x'_i} \frac{1 - e^{ik_i L}}{1 - e^{ik_i}} = \prod_{i=1}^d e^{ik_i x'_i} e^{ik_i(L-1)} \frac{\sin \frac{k_i L}{2}}{\frac{k_i}{2}}$$

erhält man

$$\sum_{x_1 \in x', x_2 \in 0'} e^{ik \cdot (x_1 - x_2)} = e^{-ik \cdot x'} \tilde{F}_L(k)$$

mit

$$\tilde{F}_L(k) := \prod_{i=1}^d \left( \frac{\sin \left( \frac{k_i L}{2} \right)}{\sin \left( \frac{k_i}{2} \right)} \right)^2$$

Also

$$\begin{aligned} (\beta L^d)^2 \mu'_2 &= \int_{-\pi}^{\pi} \dots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \tilde{G}_c^2(k) \sum_{x' \in \Lambda'} x'^2 e^{-ik \cdot x'} \tilde{F}_L(k) \\ &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_{x' \in \Lambda'} \left( - \frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} e^{-ik \cdot x'} \right) \tilde{G}_c^2(k) \tilde{F}_L(k) \\ &\stackrel{\text{partiell}}{=} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_{x' \in \Lambda'} e^{-ik \cdot x'} \left( - \frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{G}_c^2(k) \tilde{F}_L(k) \\ &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_{m \in \mathbb{Z}^d} e^{-ik \cdot mL} \left( - \frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{G}_c^2(k) \tilde{F}_L(k) \\ &= \left( \frac{2\pi}{L} \right)^d \sum_{m \in \mathbb{Z}^d} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \delta^d(k + \frac{2\pi m}{L}) \left( - \frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{G}_c^2(k) \tilde{F}_L(k) \end{aligned}$$

$$\boxed{(\beta L^d)^2 \mu'_2 = \frac{1}{L^d} \sum_{m \in \mathbb{Z}^d : -\frac{L}{2} < m_i \leq \frac{L}{2}} \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{G}_c^2(k) \tilde{F}_L(k) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m}} \quad (\text{C.1})$$

Für gerade  $L$  wurde im letzten Schritt für das Integral über die  $\delta$ -Distribution die obere Grenze gewählt, statt es auf die obere und die untere Grenze zu je  $\frac{1}{2}$  aufzuteilen. Aufgrund der Periodizität der Integranden ist dies möglich. Für ungerade  $L$  ist die Summe also symmetrisch um  $m = 0$ , für gerade  $L$  unsymmetrisch.

Für die Berechnung von

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{G}_c^2(k) \tilde{F}_L(k) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m}$$

stellt man zunächst fest, daß

$$\frac{\partial}{\partial k^\nu} \tilde{F}_L(k) \Big|_{k_\nu=\frac{2\pi}{L}m_\nu} = 0$$

gilt, denn (o.E.  $\nu = 1$ )

$$\frac{\partial}{\partial k^1} \tilde{F}_L(k) = \prod_{i=2}^d \left( \frac{\sin \frac{k_i L}{2}}{\sin \frac{k_i}{2}} \right)^2 2 \frac{\sin \frac{k_1 L}{2}}{\sin \frac{k_1}{2}} \frac{\frac{1}{2} L \cos \frac{k_1 L}{2} \sin \frac{k_1}{2} - \frac{1}{2} \sin \frac{k_1 L}{2} \cos \frac{k_1}{2}}{\sin^2 \frac{k_1}{2}}$$

Problematisch sind nur die Stellen von  $k$ , an denen die Nenner verschwindet, für die anderen Stellen mit  $k_\nu = \frac{2\pi}{L}m_\nu$  ist die Behauptung klar. Für die Nullstellen des Sinus bedeutet dies

$$\frac{k_1}{2} = \frac{\pi}{L} m_1 \stackrel{!}{=} 2\pi n, n \in \mathbb{Z} \Leftrightarrow \frac{m_1}{2L} \in \mathbb{Z}$$

und daher ist nur  $m_1 = 0$  zu untersuchen.

Für kleine  $k_1$  erhält man für den Zähler des letzten Bruches (bis 5. Ordnung entwickelt)

$$\frac{1}{2} \left( L \left( 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_1 L}{2} \right)^2 \right) \left( \frac{k_1}{2} - \frac{1}{3} \left( \frac{k_1}{2} \right)^3 \right) - \left( \frac{k_1 L}{2} - \frac{1}{3} \left( \frac{k_1}{2} \right)^3 \right) \left( 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_1}{2} \right)^2 \right) \right) + \mathcal{O}(k_1^5).$$

Ausmultipliziert und zusammengefaßt erhält man

$$-\frac{k_1^3 L}{48} (L^2 - 1) + \mathcal{O}(k_1^5).$$

Dies gleicht die Pole durch die Nenner aus und aufgrund der zusätzlichen Sinusfunktion im Zähler ist daher im Grenzwert

$$\frac{\partial}{\partial k^\nu} \tilde{F}_L(k) \Big|_{k=0} = 0 .$$

Folglich gilt

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{G}_c^2(k) \tilde{F}_L(k) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m} \\ &= \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \tilde{G}_c^2(k) \right) \tilde{F}_L(k) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m} + \tilde{G}_c^2(k) \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \tilde{F}_L(k) \right) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m} \\ &= L^{2d} \delta_{m,0} \mu_2 + \tilde{G}_c^2(k) \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \tilde{F}_L(k) \right) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m} \end{aligned}$$

und damit

$$(\beta L^d)^2 \mu'_2 = \frac{1}{L^d} \left( L^{2d} \mu_2 + \sum_{m \in \mathbb{Z}^d : -\frac{L}{2} < m_i \leq \frac{L}{2}} \tilde{G}_c^2(k) \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \tilde{F}_L(k) \right) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m} \right) . \quad (\text{C.2})$$

Im letzten Schritt wurde ausgenutzt, daß

$$-\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \tilde{G}_c^2(0) = \mu_2$$

gilt, sowie

$$\tilde{F}_L\left(\frac{2\pi}{L}m\right) = \begin{cases} 0 & m \neq 0 \\ L^{2d} & m = 0 \end{cases}$$

durch eindeutige stetige Ergänzung von  $\tilde{F}$  bei 0.

Dem Ziel  $\mu'_2$  durch die Suszeptibilitäten  $\chi_n, \mu_2$  auszudrücken, ist man damit schon näher gekommen. Es bleibt als letzter Ausdruck

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \tilde{F}_L(k) \right) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m}$$

zu berechnen.

Dazu wird eine weitere Ableitung des oben gefundenen Ausdruckes der ersten Ableitung berechnet

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2}{(\partial k^1)^2} \tilde{F}_L(k) \\ &= \prod_{i=2}^d \left( \frac{\sin \frac{k_i L}{2}}{\sin \frac{k_i}{2}} \right)^2 \frac{\partial}{\partial k^1} \frac{\sin \frac{k_1 L}{2}}{\left( \sin \frac{k_1}{2} \right)^3} \left( L \cos \frac{k_1 L}{2} \sin \frac{k_1}{2} - \sin \frac{k_1 L}{2} \cos \frac{k_1}{2} \right) . \end{aligned}$$

Betrachten wir nur den von  $k_1$  abhängigen Teil:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial k^1} \frac{\sin \frac{k_1 L}{2}}{\left(\sin \frac{k_1}{2}\right)^3} \left( L \cos \frac{k_1 L}{2} \sin \frac{k_1}{2} - \sin \frac{k_1 L}{2} \cos \frac{k_1}{2} \right) \\
&= \left\{ \left( \frac{\frac{1}{2} L C_L S^3 - \frac{1}{2} S_L 3 S^2 C}{S^6} \right) (L C_L S - S_L C) + \right. \\
&\quad \left. \frac{S_L}{S^3} \left( -\frac{1}{2} L^2 S_L S + L \frac{1}{2} C_L C - L \frac{1}{2} C_L C + \frac{1}{2} S_L S \right) \right\} \\
&= \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{L C_L S - 3 S_L C}{S^4} \right) (L C_L S - S_L C) + \right. \\
&\quad \left. \frac{S_L}{S^3} \left( -\frac{L^2}{2} S_L S + \frac{1}{2} S_L S \right) \right\} \\
&= \frac{1}{2 S^4} \left\{ L^2 C_L^2 S^2 - 4 L C_L S_L C S + 3 S_L^2 C^2 - (L^2 - 1) S_L^2 S^2 \right\}
\end{aligned}$$

Zur Abkürzung wurde dabei  $C_L = \cos \frac{k_1 L}{2}$  und  $C = \cos \frac{k_1}{2}$  benutzt, entsprechend  $S$  und  $S_L$  für den Ausdruck mit dem Sinus statt dem Cosinus. Wie oben diskutiert, ist die Funktion bei  $k = \frac{2\pi}{L} m$  auszuwerten. Wieder ist dabei nur  $m_1 = 0$ , d.h.  $k_1 = 0$  kritisch, weil nur dort der Nenner für die zugelassenen Werte von  $m$  singulär wird. Für  $k_1 = \frac{2\pi}{L} m_1, m_1 \neq 0$ , erhält man

$$\frac{\partial}{\partial k^1} \frac{\sin \frac{k_1 L}{2}}{\left(\sin \frac{k_1}{2}\right)^3} \left( L \cos \frac{k_1 L}{2} \sin \frac{k_1}{2} - \sin \frac{k_1 L}{2} \cos \frac{k_1}{2} \right) \Big|_{k_1=\frac{2\pi}{L}m_1} = \frac{L^2}{2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_1} .$$

Nun bleibt also der Grenzwert  $k_1 \rightarrow 0$  zu diskutieren. Für den letzten Term existiert er separat

$$\lim_{k_1 \rightarrow 0} \frac{(L^2 - 1)}{2} \frac{\sin^2 \frac{L}{2} k_1 \sin^2 \frac{1}{2} k_1}{\sin^4 \frac{L}{2} k_1} = \frac{(L^2 - 1)L^2}{2} ,$$

und für die ersten drei Terme entwickelt man die Kosinusfunktionen bis zur 2. Ordnung und die Sinusfunktionen bis zur 3. Ordnung und rechnet alle Beiträge bis einschließlich zur Ordnung  $k_1^5$  aus. Rationell ist es, die beiden Beiträge aufzuspalten

$$L^2 C_L^2 S^2 - 4 L C_L S_L C S + 3 S_L^2 C^2 = L C_L S (L C_L S - S_L C) - 3 S_L C (L C_L S - S_L C) ,$$

denn die Ausdrücke in den Klammern wurden bereits oben berechnet. Es ergibt sich

$$L C_L S - S_L C = -\frac{k_1^3 L}{24} (L^2 - 1) + \mathcal{O}(k_1^5) .$$

Eingesetzt in obige Gleichung hat man nun also

$$\begin{aligned}
& L^2 C_L^2 S^2 - 4LC_L S_L C S + 3S_L^2 C^2 \\
&= (LC_L S - 3S_L C)(-\frac{k_1^3 L}{24}(L^2 - 1) + \mathcal{O}(k_1^5)) \\
&= (-\frac{k_1^3 L}{24}(L^2 - 1) + \mathcal{O}(k_1^5) - 2S_L C)(-\frac{k_1^3 L}{24}(L^2 - 1) + \mathcal{O}(k_1^5)) \\
&= 2S_L C \frac{k_1^3 L}{24}(L^2 - 1) + \mathcal{O}(k_1^5) \\
&= \frac{k_1^4 L^2}{24}(L^2 - 1) + \mathcal{O}(k_1^5)
\end{aligned}$$

Für den Grenzwert ergibt sich damit

$$\lim_{k_1 \rightarrow 0} \frac{L^2 C_L^2 S^2 - 4LC_L S_L C S + 3S_L^2 C^2}{2S^4} = \frac{2^4}{2 \cdot 24} L^2(L^2 - 1) = \frac{1}{3} L^2(L^2 - 1),$$

und somit

$$\lim_{k_1 \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial k_1} \frac{\sin \frac{k_1 L}{2}}{\left(\sin \frac{k_1}{2}\right)^3} \left( L \cos \frac{k_1 L}{2} \sin \frac{k_1}{2} - \sin \frac{k_1 L}{2} \cos \frac{k_1}{2} \right) = -\frac{1}{6} L^2(L^2 - 1).$$

Zusammengefaßt hat man also

$$\frac{\partial^2}{\partial k_1 \partial k^1} \tilde{F}\left(\frac{2\pi}{L} m_1, k_2, \dots, k_d\right) = \prod_{i=2}^d \left( \frac{\sin \frac{k_i L}{2}}{\sin \frac{k_i}{2}} \right)^2 \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{L^2}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_1} & m_1 \neq 0 \\ -\frac{1}{6} L^2(L^2 - 1) & m_1 = 0 \end{cases}.$$

Dies gilt entsprechend für die Ableitungen nach  $k_\nu$ . Daher ist man jetzt am Zwischenziel angelangt und hat

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \tilde{F}_L \right) \left( \frac{2\pi}{L} m \right) = \sum_{i=1}^d \left( \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^d (L^2 \delta_{m_j, 0}) \right) \begin{cases} -\frac{1}{2} \frac{L^2}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_i} & m_i \neq 0 \\ \frac{1}{6} L^2(L^2 - 1) & m_i = 0 \end{cases} \\
& \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \dots \sum_{\substack{m_d \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_d \leq \frac{L}{2}}} \tilde{G}_c^2(k) \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{F}_L(k) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L} m} \\
&= \sum_{i=1}^d \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \dots \sum_{\substack{m_d \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_d \leq \frac{L}{2}}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^d (L^2 \delta_{m_j, 0}) \tilde{G}_c^2(k) \\
&\quad \left( \delta_{m_i, 0} \frac{1}{6} L^2(L^2 - 1) - (1 - \delta_{m_i, 0}) \frac{1}{2} \frac{L^2}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_i} \right)
\end{aligned}$$

Durch umnumerieren der  $m_i$  kann man die Summe im Ausdruck für  $\mu'_2$  nun vereinfachen.

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \dots \sum_{\substack{m_d \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_d \leq \frac{L}{2}}} \tilde{G}_c^2(k) \left( -\frac{\partial^2}{\partial k_\nu \partial k^\nu} \right) \tilde{F}_L(k) \Big|_{k=\frac{2\pi}{L}m} \\
&= \sum_{i=1}^d \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \dots \sum_{\substack{m_d \in \mathbb{Z} \\ -\frac{L}{2} < m_d \leq \frac{L}{2}}} \prod_{j=2}^d (L^2 \delta_{m_j,0}) \tilde{G}_c^2\left(\frac{2\pi}{L}m\right) \\
&\quad \left( \delta_{m_1,0} \frac{1}{6} L^2 (L^2 - 1) - (1 - \delta_{m_1,0}) \frac{1}{2} \frac{L^2}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_1} \right) \\
&= \sum_{i=1}^d L^{2(d-1)} \left( \frac{1}{6} L^2 (L^2 - 1) \chi_2 - \frac{L^2}{2} \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} - \{0\} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \tilde{G}_c^2\left(\frac{2\pi}{L}m_1, 0, \dots, 0\right) \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_1} \right) \\
&= L^{2(d-1)} \frac{d}{6} L^2 (L^2 - 1) \chi_2 - d L^{2(d-1)} \frac{L^2}{2} \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} - \{0\} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \tilde{G}_c^2\left(\frac{2\pi}{L}m_1, 0, \dots, 0\right) \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_1}
\end{aligned}$$

Dabei wurden die Komponenten des Vektors  $k$  einzeln ausgeschrieben.

Man erhält so das Zwischenergebnis

$$\begin{aligned}
(\beta L^d)^2 \mu'_2 &= \frac{1}{L^d} \left( L^{2d} \mu_2 + L^{2(d-1)} \frac{d}{6} L^2 (L^2 - 1) \chi_2 \right. \\
&\quad \left. - d L^{2(d-1)} \frac{L^2}{2} \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} - \{0\} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \tilde{G}_c^2\left(\frac{2\pi}{L}m_1, 0, \dots, 0\right) \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{L} m_1} \right).
\end{aligned}$$

Für die Blockgröße  $L = 2$  besteht die Summe sogar nur aus einem Term mit  $m_1 = 1$ . Für den benötigten Fall  $L = 2$  reduziert sich die Summe auf

$$(\beta L^d)^2 \mu'_2 = \frac{1}{L^d} \left( L^{2d} \mu_2 + L^{2(d-1)} \frac{d}{6} L^2 (L^2 - 1) \chi_2 - d L^{2(d-1)} \frac{L^2}{2} \tilde{G}_c^2(\pi, 0, \dots, 0) \right).$$

Damit ist das Ziel, die rechte Seite durch (gewichtete) Suszeptibilitäten auf dem Gitter  $\Lambda$  auszudrücken, erreicht. Denn man kann  $\tilde{G}_c^2$  per Fouriertransformation durch eine gewichtet Summe über  $G_c$  ausdrücken.

Für die Berechnung hoher Ordnungen der LCE geht man jedoch zunächst über die 1PI-Suszeptibilitäten, daher ist es sinnvoll, den letzten Term durch 1PI-Suszeptibilitäten auszudrücken, die direkt berechenbar sind. Für die ersten beiden Terme der

rechten Seite, sind die Beziehungen zu 1PI-Suszeptibilitäten bekannt (vgl. Kapitel 3). In diesem Sinne bleibt der letzte Term zu berechnen.

Die zusammenhängende Zweipunktfunktion und die 1PI-Zweipunktfunktionen hängen durch

$$\tilde{G}_c^2(k) = \frac{\tilde{G}_2^{1PI}(k)}{1 - \tilde{v}(k)\tilde{G}_2^{1PI}(k)}$$

zusammen.  $\tilde{v}$  ist die Fouriertransformierte des Hopping-Propagators

$$v(x, y) = v(x - y) = 2\kappa$$

für  $x, y$  nächste Nachbarn und 0 sonst:

$$\tilde{v}(k) = \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\nu=1}^d v(x) e^{ik \cdot x} = \sum_{\nu=1}^d 2\kappa(e^{ik_\nu} + e^{-ik_\nu}) = \sum_{\nu=1}^d 2\kappa \cos k_\nu$$

Ferner ist aufgrund der Symmetrie von  $G^{1PI}$

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{1PI}\left(\frac{2\pi}{L}m_1, 0, \dots, 0\right) &= \sum_{x \in \Lambda} e^{i\frac{2\pi}{L}m_1 x_1} G^{1PI}(x) \\ &= \sum_{x \in \Lambda} \cos\left(\frac{2\pi}{L}m_1 x_1\right) G^{1PI}(x) \\ &= \sum_{x \in \Lambda} \left(1 - 2 \sin^2\left(\frac{\pi}{L}m_1 x_1\right)\right) G^{1PI}(x) \\ &= \chi_2^{1PI} - 2\mu_2^{(L, m_0)1PI}, \end{aligned}$$

wenn man

$$\mu_2^{(L, m_0)1PI} := \sum_{x \in \Lambda} \sin^2\left(\frac{\pi}{L}m_1 x_1\right) G^{1PI}(x)$$

definiert. Dann ist

$$\begin{aligned} \mu_2^{(L)} &:= \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} - \{0\} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \tilde{G}_c^2\left(\frac{2\pi}{L}m_1, 0, \dots, 0\right) \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{L}m_1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1 \in \mathbb{Z} - \{0\} \\ -\frac{L}{2} < m_1 \leq \frac{L}{2}}} \frac{\chi_2^{1PI} - 2\mu_2^{(L, m_0)1PI}}{1 - \tilde{v}\left(\frac{2\pi}{L}m_1, 0, \dots, 0\right)(\chi_2^{1PI} - 2\mu_2^{(L, m_0)1PI})} \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{L}m_1}, \end{aligned}$$

wobei die Summe zur leichteren Berechenbarkeit aufgrund der Symmetrie der Summanden auf positive  $m_1$  beschränkt werden kann, wenn man den Spezialfall für gerade  $L$  beachtet. Als Endergebnis erhält man

$$(\beta L^d)^2 \mu_2' = \frac{1}{L^d} \left( L^{2d} \mu_2 + L^{2(d-1)} \frac{d}{6} L^2 (L^2 - 1) \chi_2 - d L^{2(d-1)} L^2 \mu_2^{(L)} \right),$$

und nach Vereinfachung den Ausdruck

$$\boxed{\mu'_2 = \frac{1}{\beta^2 L^d} \left( \mu_2 + \frac{d}{6} (L^2 - 1) \chi_2 - d\mu_2^{(L)} \right)}, \quad (\text{C.3})$$

der nur noch Größen enthält, die durch 1PI-Graphen leicht auszudrücken sind und damit der Berechnung durch die LCE zugänglich sind.

## C.2 1PI-Suszeptibilitäten und renormierte Kopplungen

Der automatisierten LCE direkt zugänglich sind die 1PI-Suszeptibilitäten. Daher ist es sinnvoll, die gefundenen Skalenrelationen für die Suszeptibilitäten in solche für die 1PI-Suszeptibilitäten umzurechnen, und dann die Skalenrelationen der renormierten Kopplungen durch die so gefundenen Beziehungen auszudrücken. Diese Beziehungen können in den Programmen zur Flussbestimmung dann direkt verwendet werden, daher wird bei ihrer Herleitung gleich darauf geachtet, daß sie sich später ökonomisch berechnen lassen, d.h. man sucht nach dem Auftreten gleicher Ausdrücke und präpariert sie heraus. Mit  $\beta^2 = L^{2-d-\eta}$  hat man

$$\chi'_{2n} = \frac{\chi_{2n}}{L^{n(2-d-\eta)+d(2n-1)}} + \delta_{n,1} \frac{1}{\alpha} = \frac{\chi_{2n}}{L^{d(n-1)+2n-n\eta}} + \delta_{n,1} \frac{1}{\alpha}$$

und

$$\begin{aligned} \mu'_2 &= \frac{1}{L^{2-d-\eta+d+2}} \left( \mu_2 + d \frac{L^2 - 1}{6} \chi_2 - d\mu_2^{(L)} \right) \\ &= \frac{1}{L^{4-\eta}} \left( \mu_2 + d \frac{L^2 - 1}{6} \chi_2 - d\mu_2^{(L)} \right). \end{aligned}$$

Diese Gleichungen werden nun in die Beziehungen für die 1PI-Suszeptibilitäten umgerechnet. Aus

$$\chi_2 = \frac{\chi_2^{1PI}}{1 - 2\kappa'2d\chi_2^{1PI}} = \frac{1}{(\chi_2^{1PI})^{-1} - 2\kappa'2d}$$

erhält man mit der Skalenrelation für  $\chi_2$

$$\begin{aligned} \frac{1}{(\chi_2'^{1PI})^{-1} - 2\kappa'2d} &= L^{-2+\eta} \frac{1}{(\chi_2^{1PI})^{-1} - 2\kappa'2d} + \frac{1}{\alpha} \\ \Rightarrow (\chi_2')^{-1} &= \frac{1}{\chi_2'^{1PI}} - 2\kappa'2d = \frac{\alpha((\chi_2^{1PI})^{-1} - 2\kappa'2d)}{L^{-2+\eta}\alpha + (\chi_2^{1PI})^{-1} - 2\kappa'2d} \\ &= \frac{(\chi_2^{1PI})^{-1} - 2\kappa'2d}{L^{-2+\eta} + ((\chi_2^{1PI})^{-1} - 2\kappa'2d)\alpha^{-1}} = \frac{X_1}{L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1}}, \end{aligned}$$

mit

$$X_1 := (\chi_2^{1PI})^{-1} - 2\kappa 2d = \chi_2^{-1}.$$

Für die gewichtete Suszeptibilität  $\mu_2$  gilt

$$\mu_2 = \frac{\mu_2^{1PI} + 2\kappa 2d(\chi_2^{1PI})^2}{(1 + 2\kappa 2d\chi_2^{1PI})^2} = \frac{\frac{\mu_2^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^2} + 2\kappa 2d}{((\chi_2^{1PI})^{-1} + 2\kappa 2d)^2} = \frac{X_2 + 2\kappa 2d}{X_1^2},$$

mit

$$X_2 := \frac{\mu_2^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^2}.$$

Für die Skalenrelation ergibt sich daher

$$\begin{aligned} \mu'_2 &= \frac{X'_2 + 2\kappa' 2d}{X'^2_1} \\ &= L^{-4+\eta} \left( \frac{X_2 + 2\kappa 2d}{X_1^2} + d \left( \frac{L^2 - 1}{6} \frac{1}{X_1} - \mu_2^{(L)} \right) \right) \\ &= L^{-4+\eta} \frac{1}{X_1^2} \left( X_2 + 2\kappa 2d + dX_1 \left( \frac{L^2 - 1}{6} - X_1 \mu_2^{(L)} \right) \right) \end{aligned}$$

und

$$\frac{\chi'_2}{\mu'_2} = \frac{L^{-2+\eta} + X_1 \alpha^{-1}}{X_1} L^{4-\eta} X_1^2 \left( X_2 + 2\kappa 2d + dX_1 \left( \frac{L^2 - 1}{6} - X_1 \mu_2^{(L)} \right) \right)^{-1}$$

also

$$\frac{\chi'_2}{\mu'_2} = L^{4-\eta} (L^{-2+\eta} + X_1 \alpha^{-1}) X_1 \left( X_2 + 2\kappa 2d + dX_1 \left( \frac{L^2 - 1}{6} - X_1 \mu_2^{(L)} \right) \right)^{-1}. \quad (\text{C.4})$$

Für  $\chi_4$  gilt

$$\chi_4 = \frac{\chi_4^{1PI}}{(1 - 2\kappa 2d\chi_2^{1PI})^4} = \frac{\chi_4^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^4 X_1^4},$$

die Skalenrelation lautet damit

$$\chi'_4 = \frac{\chi'^{1PI}_4}{(\chi'^{1PI}_2)^4 X'^4_1} = L^{-d-4+2\eta} \chi_4 = L^{-d-4+2\eta} \frac{\chi_4^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^4 X_1^4},$$

und für die spätere Verwendung wird noch

$$\begin{aligned} \frac{\chi'^2_2}{\chi'_4} &= L^{d+4-2\eta} \frac{(\chi_2^{1PI})^4 X_1^4 (L^{-2+\eta} + X_1 \alpha^{-1})^2}{\chi_4^{1PI} X_1^2} \\ &= L^{d+4-2\eta} \frac{(\chi_2^{1PI})^4 X_1^2 (L^{-2+\eta} + X_1 \alpha^{-1})^2}{\chi_4^{1PI}} \end{aligned}$$

notiert.

### C.2.1 Renormierte Kopplungen

Mit den Informationen des letzten Abschnittes kann man nun die Skalenrelationen der renormierten Kopplungen, ausgedrückt durch die 1PI-Suszeptibilitäten, berechnen. Für die renormierte Masse gilt

$$\frac{m_r^2}{2d} = \frac{\chi_2}{\mu_2} = \frac{1}{X_1} \frac{X_1^2}{(X_2 + 2d2\kappa)} = \frac{X_1}{(X_2 + 2d2\kappa)}.$$

Die Skalenrelation erhält man, indem man die Formel (C.4) für  $\frac{\chi'_2}{\mu'_2}$  von oben benutzt

$$\begin{aligned} \frac{m'^2}{2d} &= \frac{\chi'_2}{\mu'_2} = \frac{L^{4-\eta}(L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1})X_1}{X_2 + 2\kappa2d + dX_1\left(\frac{L^2-1}{6} - X_1\mu_2^{(L)}\right)} \\ &= \frac{L^{4-\eta}(L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1})X_1}{(X_2 + 2\kappa2d)\left(1 + d\frac{X_1}{X_2 + 2\kappa2d}\left(\frac{L^2-1}{6} - X_1\mu_2^{(L)}\right)\right)} \\ &= \frac{m_r^2}{2d} \frac{L^{4-\eta}(L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1})}{\left(1 + d\frac{m_r^2}{2d}\left(\frac{L^2-1}{6} - X_1\mu_2^{(L)}\right)\right)} \\ &= \frac{m_r^2}{2d} \frac{L^{4-\eta}(L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1})}{\mathcal{S}} \end{aligned}$$

mit

$$\mathcal{S} := 1 + d\frac{m_r^2}{2d}\left(\frac{L^2-1}{6} - X_1\mu_2^{(L)}\right).$$

Der Vollständigkeit halber sei hier noch die Berechnung von  $Z_r$  notiert

$$\frac{Z_r}{2d} = \frac{\chi_2^2}{\mu_2} = \frac{1}{X_1^2} \frac{X_1^2}{X_2 + 2d2\kappa} = \frac{1}{X_2 + 2d2\kappa}.$$

Interessant ist wieder die renormierte Kopplung  $g_r$ . Für  $g_r$  ergibt sich

$$-\frac{g_r}{(2d)^2} = \frac{\chi_4}{\mu_2^2} = \frac{\chi_4^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^4(X_2 + 2\kappa2d)^2}.$$

Für die Skalenrelation ist also

$$\frac{\chi'_4}{(\mu'_2)^2} = \frac{\chi'_4}{(\chi'_2)^2} \frac{(\chi'_2)^2}{(\mu'_2)^2}.$$

Oben wurde die Berechnung des letzten Faktors bereits vorbereitet

$$\begin{aligned} \frac{\chi'_2}{\mu'_2} &= L^{4-\eta}(L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1}) \frac{m_r^2}{2d} \left(1 + d\frac{m_r^2}{2d}\left(\frac{L^2-1}{6} - X_1\mu_2^{(L)}\right)\right)^{-1} \\ &= L^{4-\eta}(L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1}) \frac{m_r^2}{2d} \mathcal{S}^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\chi'_4}{(\mu'_2)^2} &= \frac{L^{-d-4+2\eta}\chi_4^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^4 X_1^2 (L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1})^2} L^{8-2\eta} (L^{-2+\eta} + X_1\alpha^{-1})^2 \left(\frac{m_r^2}{2d}\right)^2 \mathcal{S}^{-2} \\
&= \frac{L^{4-d}\chi_4^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^4 X_1^2} \left(\frac{m_r^2}{2d}\right)^2 \mathcal{S}^{-2} = \frac{L^{4-d}\chi_4^{1PI}}{(\chi_2^{1PI})^4 X_1^2} \left(\frac{X_1}{X_2 + 2d2\kappa}\right)^2 \mathcal{S}^{-2} \\
&= L^{4-d}\chi_4^{1PI} \left(\frac{(\chi_2^{1PI})^{-2}}{X_2 + 2d2\kappa}\right)^2 \mathcal{S}^{-2} = L^{4-d}\frac{\chi_4^{1PI}}{\mu_2^2} \mathcal{S}^{-2}
\end{aligned}$$

Damit gilt

$$-\frac{g'_r}{(2d)^2} = \frac{\chi'_4}{(\mu'_2)^2} = -\frac{g_r}{(2d)^2} L^{4-d} \mathcal{S}^{-2}.$$

# ANHANG D

---

## Dokumentation der Programme

---

Im numerischen Teil dieser Arbeit wurden einige Programme von T. Reiß verwendet oder weiterentwickelt. Weitere Programme wurden neu entwickelt. Diese Programme und ihre Abhängigkeiten werden hier dokumentiert.

### D.1 LCE-Programme

Drei Programme von T. Reiß für die automatische Berechnung der Suszeptibilitäten zu vorgegebenen Parametern wurden praktisch unverändert übernommen. Die Parameter sind u.a. der Hopping-Parameter  $\kappa$ , die Kopplung des  $(\varphi^2 - 1)^2$ -Terms  $\lambda$ , die Kopplung des  $(\varphi^2 - 1)^4$ -Terms  $\sigma$ , die Dimension  $d$ , die Anzahl lokaler Freiheitsgrade  $N$  und die Ordnung der Entwicklung – soweit die Daten dafür zu Verfügung stehen.

Diese Programme wurden bereits erfolgreich bei der Berechnung der Ergebnisse von [Rei95a, Rei95b] verwendet. Eine prinzipielle Beschreibung des Vorgehens findet sich in Kapitel 3 und z.B. in [Rei98a, Abschnitt 4.1]. Eine genauere Dokumentation des Algorithmus findet man in [Rei95a].

Die Berechnung der LCE ist auf drei Programme aufgeteilt:

1. **rgvcvec** berechnet die vollen Vertices der Linked Cluster Expansion zu gegebenen Kopplungen,
2. **vcren** berechnet die renormierten Momente und

3. `rggphchi` berechnet die 1PI-Suszeptibilitäten aus den 1VI-Graphen.

Die Programme zur Berechnung der LCE benötigen die Dateien mit den Vertexstrukturdaten `SEV-*.DAT` und `QEV-*.DAT`, die vorab für vorgegebenes  $N$  berechnet werden. Die Dimension des Ordnungsparameters  $N$  wird von den drei Programmen aus der Datei `ENVIRON.DAT` gelesen.

Die Änderungen an diesen Programmen beschränken sich darauf, die Dateien `SEV-*.DAT` und `QEV-*.DAT` aus Unterverzeichnissen zu lesen. Die Anzahl dieser Dateien ist sehr groß, daher war es für den praktischen Umgang mit diesen Programmen günstig, diese nicht im aktuellen Arbeitsverzeichnis abzulegen. Weiterhin konnte so der Zugriff auf die Daten zu  $N = 1$  und  $N = 2$  automatisiert werden, indem die Programm anhand des Eingabeparameters  $N$  selbstständig das zugehörige Unterverzeichnis ausgewählt haben.

Weitere Eingabeparameter werden aus individuellen Konfigurationsdateien gelesen (Abb. D.1).

## D.2 RG-Fluss

Ein Programm zur Flußverfolgung war zu Beginn des Projektes ebenfalls schon vorhanden. Das Programm `mrfow` berechnet einen Renormierungsgruppenschritt, d.h. die Abbildung

$$(\lambda, m_r^2/2d) \mapsto (\lambda', m'_r{}^2/2d) .$$

Gleichzeitig wird das zu  $m'_r{}^2/2d$  gehörende  $\kappa'$  berechnet. `mrfow` ruft für diese Berechnung die LCE-Programme auf.

Durch die LCE ist  $m_r^2/2d$  als Funktion von  $\kappa$  und  $\lambda$  bekannt. Im ersten Schritt wird aus der Funktion

$$\frac{m_r^2}{2d} = \frac{m_r^2}{2d}(\kappa, \lambda)$$

zu vorgegebenen  $m_r^2/2d$  und  $\lambda$  den Startwert von  $\kappa$  bestimmt.

Für die Berechnung eines RG-Schrittes wird neben  $m_r^2/2d$  auch noch  $g_r/(2d)^2$  berechnet und mit Hilfe der Skalenrelationen dieser renormierten Kopplungen aus Abschnitt C.2.1 die Größen  $m'_r{}^2/2d$  und  $g'_r/(2d)^2$  bestimmt.

Durch die LCE ist auch die Funktion

$$\frac{g_r}{(2d)^2} = \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa, \lambda)$$

bekannt. Im letzten Schritt werden nun Funktionsargumente  $\kappa', \lambda'$  gesucht, so daß

$$\frac{g'_r}{(2d)^2} = \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa', \lambda')$$

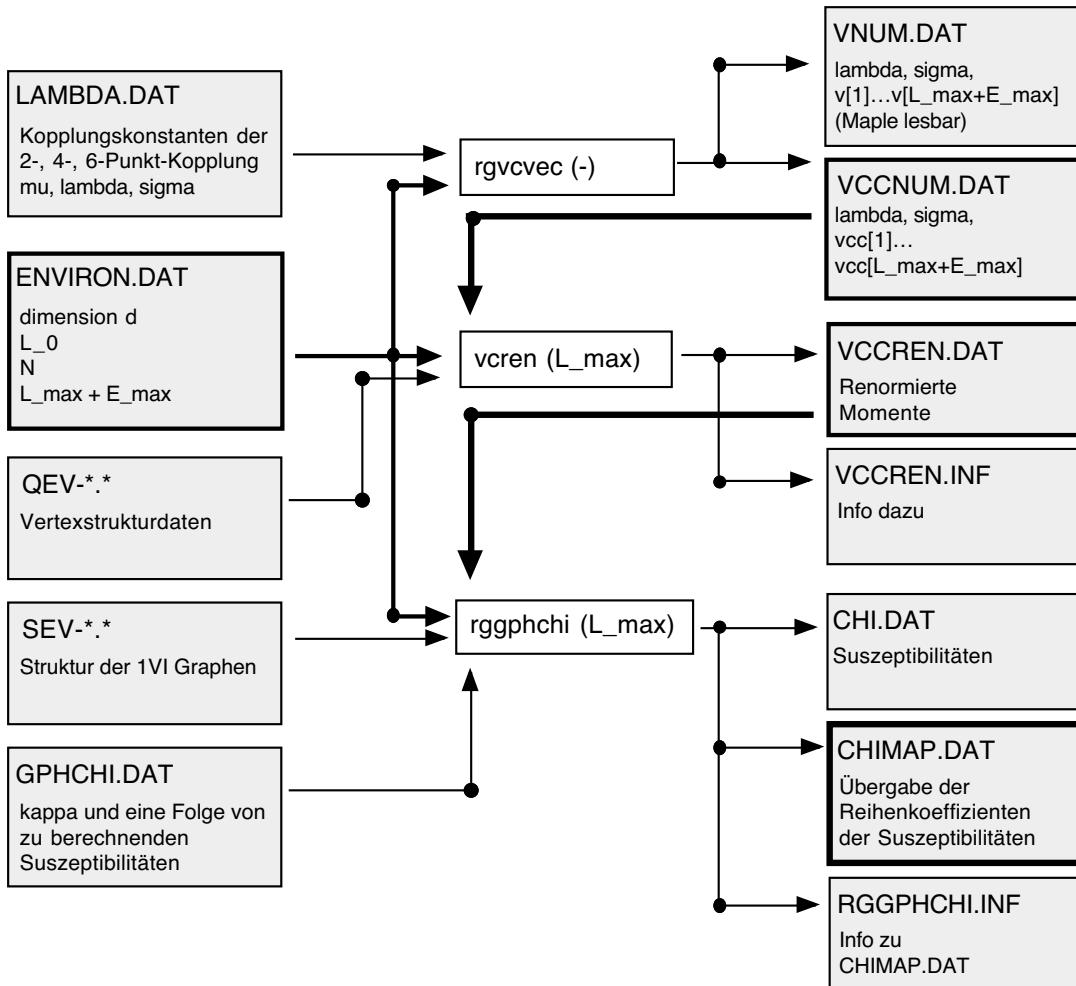


Abb. D.1: Datenfluß der LCE-Programme

möglichst gut erfüllt ist.

Dies geschieht mit Hilfe der Funktion

```
void broydn(double x[], int n, int *check, void (*vecfunc)(int, double [], double []))
```

aus den Numerical Recipes [PTVF92]. `broydn` sucht die Nullstelle eines nichtlinearen Funktionensystems, das durch den Eingabeparameter `vecfunc` definiert wird. `n` gibt als Eingabeparameter die Anzahl der Funktionen des Systems an. `x[]` enthält als Eingabe einen Schätzwert für die Nullstelle und als Ausgabe die gefundene Nullstelle. `*check` ist ein Flag, das angibt, ob `broydn` regulär terminiert hat oder ob ein Fehler aufgetreten ist.

`broydn` wird ferner von verschiedenen Parametern kontrolliert. Für die Anwendung ist besonders der Parameter `TOLF` interessant, der die Toleranz bei der Bestimmung

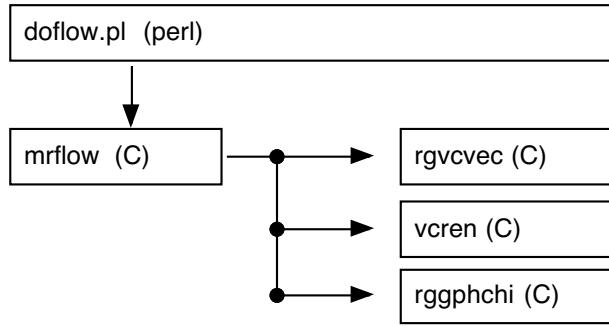


Abb. D.2: Aufrufstruktur der Programme

der Nullstelle angibt. Es wurden Rechnungen mit Genauigkeiten von  $\text{TOLF} = 10^{-4}$  bis  $\text{TOLF} = 10^{-8}$  durchgeführt.

Zur Verwendung von **broydn** wurde die Funktion

```
void srViolation( int n, double x[], double f[] )
```

definiert.

In der ursprünglichen Version berechnet **srViolation** nur die Gleichung für  $g_r$  und löst die Gleichung für  $m_r$  gleichzeitig. Sie erhält nur  $\lambda$  als Parameter. Aus  $\lambda$  und dem bekannten Wert von  $m_r'^2/2d$  wird wie oben durch Lösen von

$$\frac{m_r'^2}{2d} \stackrel{!}{=} \frac{m_r^2}{2d}(\kappa, \lambda)$$

dann  $\kappa$  bestimmt. Anschließend wird

$$\frac{g_r'}{(2d)^2} - \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa, \lambda)$$

berechnet und dieser Wert wird an die aufrufende Funktion **broydn** zurückgegeben. Dies wurde dadurch nahegelegt, daß bei der Lösung des aus den beiden Gleichungen bestehenden Systems für eine Blockgröße  $L = 2$  eine singuläre Jacobimatrix auftritt. Weiterhin hat dieses Vorgehen den Vorteil, daß für die Invertierung der ersten Gleichung keine weiteren Aufrufe der LCE-Programme nötig sind, weil sich nur  $\kappa$ , aber nicht  $\lambda$  ändert. Die Reihenkoeffizienten bleiben also gleich und nur der Entwicklungsparameter ändert sich. Da die Aufrufe der LCE-Programme relativ viel Zeit benötigen, spart dies Rechenzeit ein. Andererseits hat dieses Vorgehen den Nachteil, daß **broydn** nicht optimal arbeitet und man für  $\kappa$  und  $\lambda$  verschiedene Genauigkeiten erhält.  $\lambda$  wird mit der Genauigkeit von **TOLF** aus **broydn** bestimmt, für die Bestimmung von  $\kappa$  gibt es zweiten Parameter **MR\_REL\_EPSILON**, der in **mrflow** definiert ist. Dies resultierte darin, daß man  $\kappa$  immer eine Größenordnung genauer bestimmen mußte, als  $\lambda$ . Zur maximalen Genauigkeit von  $\kappa$  (**MR\_REL\_EPSILON** =  $10^{-8}$ )

gehörte eine Genauigkeit von  $\lambda$  von  $\text{TOLF} = 10^{-7}$ . Weiterhin hat `broydn` mit dieser Routine in der Nähe des vermuteten kritischen Punktes Konvergenzprobleme. Vermutlich liegt dies daran, daß durch die implizite Veränderung von  $\kappa$  Annahmen des Algorithmus verletzt sind.

Um den Unterschied bei der Genauigkeit zu vermeiden und um die Konvergenz des Verfahrens zu verbessern, wurde `srViolation` so umgeschrieben, daß es das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}\frac{m_r'^2}{2d} - \frac{m_r^2}{2d}(\kappa, \lambda) &\stackrel{!}{=} 0 \\ \frac{g_r'}{(2d)^2} - \frac{g_r}{(2d)^2}(\kappa, \lambda) &\stackrel{!}{=} 0\end{aligned}$$

berechnet. `broydn` bestimmt dann  $\kappa$  und  $\lambda$  mit der Genauigkeit `TOLF`. So konnte für beide Größen die Genauigkeit von  $\text{TOLF} = 10^{-8}$  erreicht werden. Da für  $L < 2$  die dabei auftretende Jacobimatrix nicht mehr singulär ist, war dieses Vorgehen möglich. Beide Programmversionen wurden verglichen und ihre Resultate stimmen in dem Bereich, in dem beide funktionieren, im Rahmen der eingestellten Fehler überein.

Ferner ist es möglich, mit `mrfow` auch noch den Fluß der  $(\varphi^2 - 1)^4$ -Kopplung  $\sigma$  zu bestimmen.

### D.2.1 Flußverfolgung

Da `mrfow` nur einen RG-Schritt durchführt, wurden darauf Perl-Programme aufgesetzt, die die Verfolgung von RG-Flüssen ermöglichen. Diese beruhen auf dem einfachen Prinzip, die Ausgabewerte aus den Ausgabedateien auszulesen und diese als Startwerte in die Eingabedateien zu schreiben. Dazwischen werden die Daten für verschiedene Zwecke weiterverarbeitet.

Das Perl-Programm `doflow.pl` ist ein solches Programm. Es entnimmt der Ausgabedatei `RGTARGET.DAT` die Werte von  $\kappa'$ ,  $\lambda'$  und  $m_r'^2/2d$  und sichert diese in weiteren Dateien zur späteren Weiterverarbeitung. Diese Parameter werden dann als Startparameter in `MRFLOW.DAT` geschrieben und `mrfow` wieder aufgerufen.

Aus den Daten werden Graphikdaten für das Software-Paket `pv-wave` erzeugt, die per Unix-Pipe direkt weitergegeben werden (Abb. D.3).

## D.3 Kritische Exponenten

Für die Berechnung kritischer Exponenten durch Diagonalisierung der Ableitungs-matrix müssen die Ableitungen der Funktionen  $\kappa'(\kappa, \lambda)$  und  $\lambda'(\kappa, \lambda)$  berechnet wer-

den. Die Ableitungen werden im C-Programm `lrg` mit Hilfe der Numerical Recipes Routine `dfridr` [PTVF92] berechnet, um die Fehler bei der Berechnung möglichst gering zu halten. Die Berechnung kritischer Exponenten ist bei Werten von  $L$  nahe bei 1 extrem anfällig gegen numerische Fehler und man muß alle Möglichkeiten ausschöpfen, viele signifikante Stellen bei der Berechnung der Eigenwerte der Ableitungsmatrix zu erhalten. Die Routine `dfridr` liefert ferner auch Fehlerangaben für die berechneten Ableitungen, die man für die Fehlerrechnung der kritischen Exponenten verwenden kann.

Für die Berechnung der Funktionen  $\kappa'(\kappa, \lambda)$  und  $\lambda'(\kappa, \lambda)$  wurde das Programm `mrfollow` umgeschrieben, damit es als Eingabeparameter  $\kappa$  verwendet und nicht  $m_r^2/2d$ . Dieses modifizierte Programm heißt `kflow` und wird von einem weiteren Perl-Programm `kappa.pl` gesteuert. Dieses Programm bekommt von `lrg` die Eingabeparameter  $\kappa$  und  $\lambda$  und liefert die Funktionswerte  $\kappa', \lambda'$ . Es erzeugt die Eingabedateien für `kflow` und extrahiert die relevanten Informationen aus den Ausgabedateien. Für solche Aufgaben ist Perl deutlich besser geeignet als C, weil es mächtige Routinen zur Verarbeitung von Zeichenketten und Textdateien besitzt.

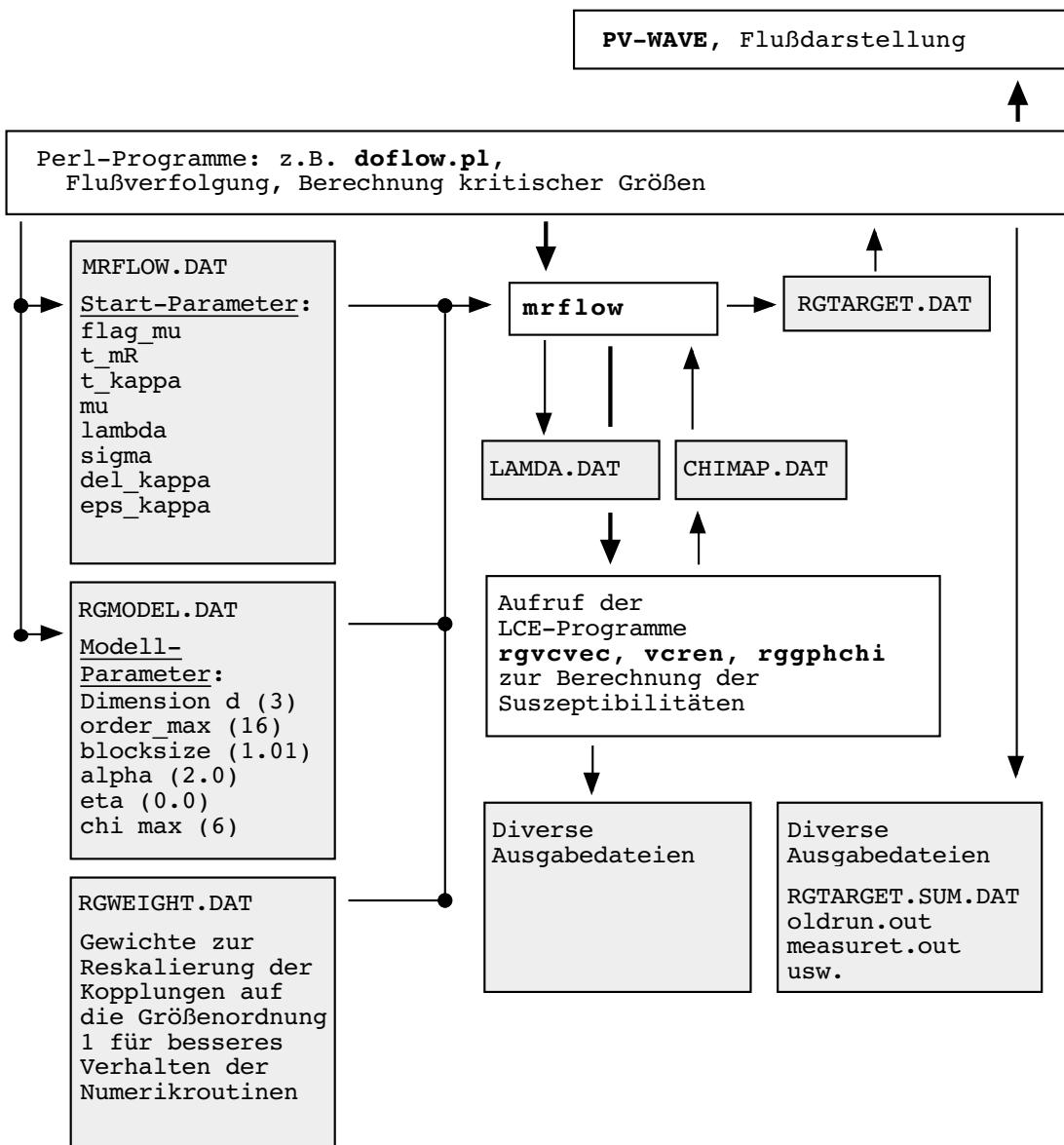


Abb. D.3: Datenfluß zur RG-Fluß-Berechnung

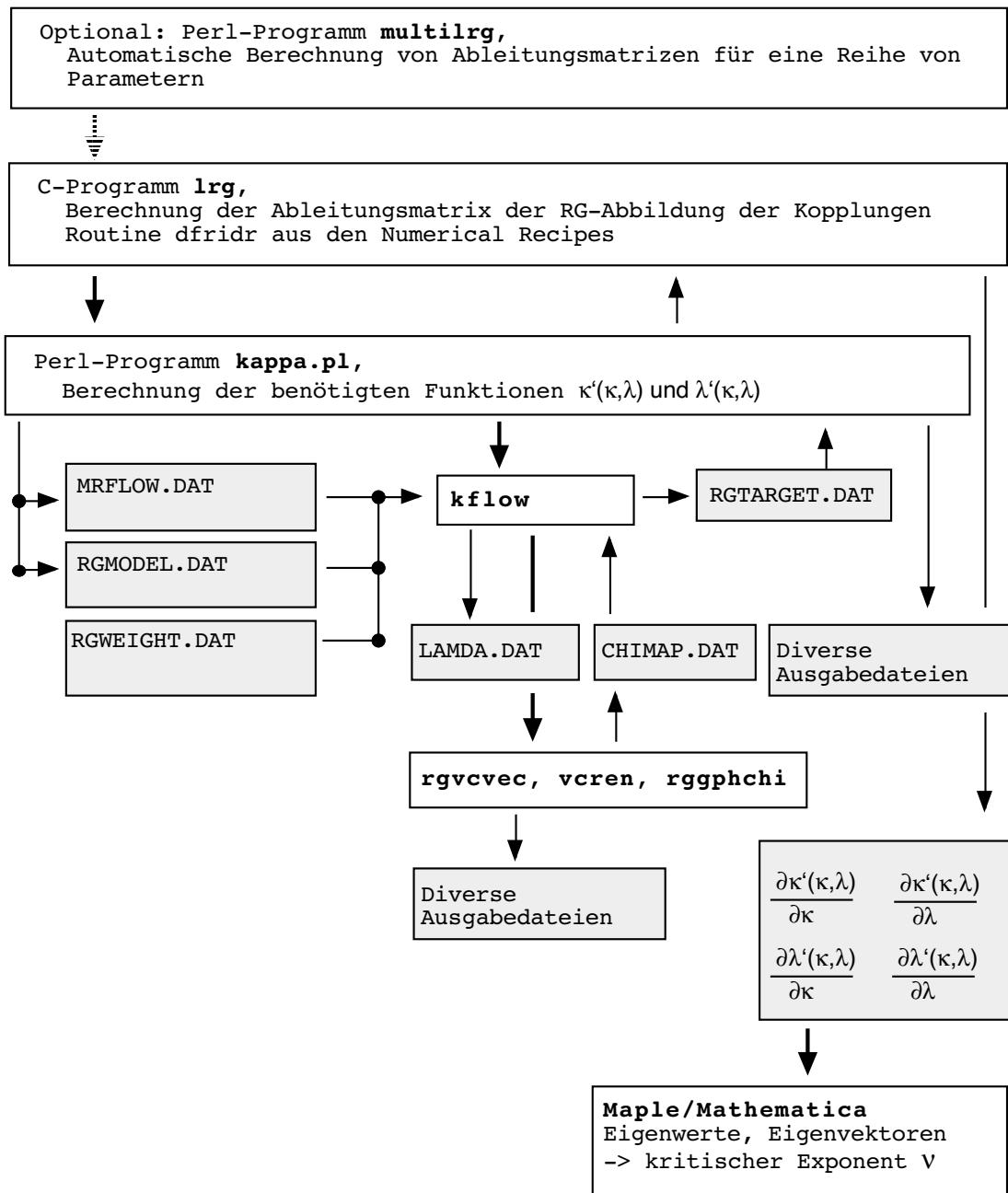


Abb. D.4: Datenfluß zur Berechnung kritischer Exponenten

# ANHANG E

---

## Ergebnisse der numerischen Rechnungen

---

In diesem Anhang sind einige Ergebnisse der numerischen Rechnungen zusammengestellt.

Im ersten Teil geht es um die Genauigkeit der Flußverfolgung. Dazu wird der Fluß für einen typischen Wert der Blockgröße in der Nähe des Fixpunktes einige Schritte weit verfolgt. Das Vorgehen wird in 5.2.2 und 5.2.3 erläutert.

### E.1 Verletzung der Skalenrelation

#### E.1.1 $N = 1$

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1784362882375717	1.0000000000000000	0.0300000005655599
1 ( $L = 1.01$ )	0.1784187101201202	0.9932374639304494	0.0306211969090366
1 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.1784187316114747 -1.20454600793327e-07	0.9932364678054618 1.00290718361028e-06	0.0306212048887586 -2.60594712379547e-07
1 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.1784187501162492 -2.24170037801271e-07	0.9932356035927797 1.8730039263002e-06	0.0306212123001948 -5.02630849075391e-07
2 ( $L = 1.01$ )	0.1784019087727955	0.9863071148166567	0.0312556380221629
2 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.1784019306105626 -1.22407698689178e-07	0.9863060958301588 1.03313307035869e-06	0.0312556465639899 -2.73289158154593e-07
2 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.1784019491844032 -2.26520041052599e-07	0.9863052218419212 1.91925487211936e-06	0.0312556544368085 -5.25173909086526e-07
3 ( $L = 1.01$ )	0.1783854504214198	0.9792236471499365	0.0319036224662961
3 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.1783854725576370 -1.24092055535157e-07	0.9792226068885723 1.0623327645201e-06	0.0319036315916382 -2.8602840036908e-07
3 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.1783854911844276 -2.28510832616879e-07 -2.30148769199472e-07	0.9792217234504170 1.96451497577304e-06 2.00880129631184e-06	0.0319036399460836 -5.47893503875684e-07 -5.70747279231165e-07

Tab. E.1: Abweichung der numerischen RG-Transformation von der Halbgruppeigenschaft für  $N = 1, L = 1.01, \sqrt{1.01}, \sqrt[10]{1.01}$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 20.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1783118841648102	1.0000000000000000	0.0299999984364118
1 ( $L = 1.01$ )	0.1782512376527635	0.9951817013439670	0.0306211645387792
1 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.1782512536088331 -8.95144954648516e-08	0.9951809603814842 7.4454994682287e-07	0.0306211709102653 -2.08074584853532e-07
1 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.1782512684253939 -1.72636279115271e-07	0.9951802706961373 1.43757449289481e-06	0.0306211769655044 -4.05821443587817e-07
2 ( $L = 1.01$ )	0.1781950918655141	0.9900451060886962	0.0312555679188702
2 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.1781951086471176 -9.41754529826466e-08	0.9900443224302953 7.91538078547772e-07	0.0312555749173619 -2.23911839355833e-07
2 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.1781951238557903 -1.79523890758794e-07	0.9900436097390009 1.5113954770051e-06	0.0312555814708916 -4.33587431080622e-07
3 ( $L = 1.01$ )	0.1781428298209508	0.9846124099473915	0.0319035069850448
3 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.1781428473656804 -9.84868692354929e-08	0.9846115857438751 8.3708422533527e-07	0.0319035146340729 -2.39755087175731e-07
3 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.1781428629486502 -1.85961452518359e-07	0.9846108503715940 1.58394895468403e-06	0.0319035217111552 -4.61582809922607e-07

Tab. E.2: Abweichung der numerischen RG-Transformation von der Halbgruppeigenschaft für  $N = 1, L = 1.01, \sqrt{1.01}, \sqrt[10]{1.01}$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 19.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1784362882375717	1.0000000000000000	0.0300000005655599
1 ( $L = 1.1$ )	0.1782562756020366	0.9298117493773208	0.0365248945548427
1 ( $L = \sqrt{1.1} \times 2$ )	0.1782578667350514 -8.92609816633396e-06	0.9297321545742927 8.5603137496819e-05	0.0365258642036714 -2.65476147299935e-05
1 ( $L = \sqrt[10]{1.1} \times 10$ )	0.1782591529103425 -1.61414137941306e-05	0.9296678010071404 0.000154814531303558	0.0365266490179551 -4.8034720805585e-05
2 ( $L = 1.1$ )	0.1778847748931823	0.8524187087332957	0.0445279024078131
2 ( $L = \sqrt{1.1} \times 2$ )	0.1778864001745749 -9.13670882505105e-06	0.8523259409357402 0.000108828908381621	0.0445296371838912 -3.89593038138814e-05
2 ( $L = \sqrt[10]{1.1} \times 10$ )	0.1778877022486504 -1.64564700370965e-05	0.8522516045114925 0.000196035375680028	0.0445310280584961 -7.01953272888001e-05
3 ( $L = 1.1$ )	0.1771216563293024	0.7728263684784669	0.0543720722448535
3 ( $L = \sqrt{1.1} \times 2$ )	0.1771230881654786 -8.08391365490611e-06	0.7727238966057141 0.000132593654839383	0.0543750080506216 -5.39947374983208e-05
3 ( $L = \sqrt[10]{1.1} \times 10$ )	0.1771242360812003 -1.45648587041418e-05	0.7726417527262452 0.000238883868035051	0.0543773603527231 -9.72577952480339e-05
4 ( $L = 1.1$ )	0.1758195378626692	0.6935572447823454	0.0665222775816836

Tab. E.3: Abweichung der numerischen RG-Transformation von der Halbgruppeigenschaft für  $N = 1, L = 1.1, \sqrt{1.1}, \sqrt[10]{1.1}$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 20.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1784362882375717	1.0000000000000000	0.0300000005655599
1 ( $L = 1.001$ )	0.1784344784452267	0.9993285523396631	0.0300618105757033
1 ( $L = \sqrt{1.001} \times 2$ )	0.1784344784274728 9.94982001706476e-11	0.9993285534548277 -1.11591390508847e-09	0.0300618105448378 1.02673448693359e-09
1 ( $L = \sqrt[10]{1.001} \times 10$ )	0.1784344894311388 -6.15683257653994e-08	0.9993280806326647 4.72023937830342e-07	0.0300618116071333 -3.4310308683477e-08
2 ( $L = 1.001$ )	0.1784326806623028	0.9986552678071936	0.0301237515849598
2 ( $L = \sqrt{1.001} \times 2$ )	0.1784326806462707 8.98495290261018e-11	0.9986552688479958 -1.04220370706163e-09	0.0301237515542867 1.01823637041056e-09
2 ( $L = \sqrt[10]{1.001} \times 10$ )	0.1784326914869309 -6.0665053299621e-08	0.9986548028135555 4.65619772046636e-07	0.0301237526120614 -3.40960719580119e-08
3 ( $L = 1.001$ )	0.1784308944039309	0.9979801632384172	0.0301858238853147
3 ( $L = \sqrt{1.001} \times 2$ )	0.1784308943906943 7.41833767057898e-11	0.9979801641535369 -9.16971780037846e-10	0.0301858238553821 9.91611216245041e-10
3 ( $L = \sqrt[10]{1.001} \times 10$ )	0.1784309052870972 -6.09937328899705e-08	0.9979796957599096 4.68424648896769e-07	0.0301858249087082 -3.3903116320607e-08

Tab. E.4: Abweichung der numerischen RG-Transformation von der Halbgruppeigenschaft für  $N = 1, L = 1.001, \sqrt{1.001}, \sqrt[10]{1.001}$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 20.

### E.1.2 N=2

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.2380388131141663	1.5000000000000000	0.0300000020522976
1 ( $L = 1.01$ )	0.2377967556053068	1.4875375091740872	0.0306302624985822
1 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.2377967551782530 1.79587735709547e-09	1.4875359167170832 1.07053233563474e-06	0.0306302696580755 -2.33739207986155e-07
1 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.2377967548359302 3.23543770921769e-09	1.4875346448882263 1.92552177223931e-06	0.0306302753790360 -4.20513986711488e-07
2 ( $L = 1.01$ )	0.2375499552787840	1.4746943005455797	0.0312743102122065
2 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.2375499545416962 3.10287495778045e-09	1.4746926877342528 1.09365807295625e-06	0.0312743178223235 -2.4333444745121e-07
2 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.2375499539516981 5.5865550966974e-09	1.4746914001391978 1.96678483186851e-06	0.0312743239015826 -4.3771952139256e-07

Tab. E.5: Abweichung der numerischen RG-Transformation von der Halbgruppeneigenschaft für  $N = 2, L = 1.01, \sqrt{1.01}, \sqrt[10]{1.01}$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 16.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.2380388131141663	1.5000000000000000	0.0300000020522976
1 ( $L = 1.01$ )	0.2354993919513886	1.3686258423361712	0.0366368559040390
1 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.2354990926810609 1.27079023531234e-06	1.3684905780308545 9.88322017110617e-05	0.0366377742613905 -2.50664891633592e-05
1 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.2354988502685918 2.30014520344789e-06	1.3683806816085804 0.00017912910892605	0.0366385180923926 -4.53692958248581e-05
2 ( $L = 1.01$ )	0.2323409233468364	1.2231592110474669	0.0448256471954237
2 ( $L = \sqrt{1.01} \times 2$ )	0.2323401219734242 3.44912725937866e-06	1.2230109254192905 0.000121231665376983	0.0448272560693213 -3.5891816365443e-05
2 ( $L = \sqrt[10]{1.01} \times 10$ )	0.2323394729388913 6.24258492311815e-06	1.2228905585092111 0.000219638241554626	0.0448285572948215 -6.49204100748476e-05

Tab. E.6: Abweichung der numerischen RG-Transformation von der Halbgruppeneigenschaft für  $N = 2, L = 1.1, \sqrt{1.1}, \sqrt[10]{1.1}$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 16.

## E.2 Systematische Fehler

### E.2.1 $N = 1$

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1784362882375717	1.0000000000000000	0.0300000005655599
1 (20)	0.1784187101201202	0.9932374639304494	0.0306211969090366
1 (19)	0.1782512367814545 0.000938653454858836	0.9951816991036545 -0.0019574726526236	0.0306211678067332 9.50397317483241e-07
1 (18)	0.1783294930835987 0.000500043053004056	0.9944822040823521 -0.00125321506397572	0.0306211659174519 1.01209579723214e-06
2 (20)	0.1784019087727955	0.9863071148166567	0.0312556380221629
2 (19)	0.1782405822370050 0.000904287049954958	0.9881431470567204 -0.0018615218449529	0.0312556056642188 1.03526743171909e-06
2 (18)	0.1783165235371512 0.000478611670870886	0.9874808237481550 -0.00119000351296924	0.0312556097247978 9.05352342412524e-07
3 (20)	0.1783854504214198	0.9792236471499365	0.0319036224662961
3 (19)	0.1782301018885742 0.00087085876386557	0.9809560328224998 -0.00176914199080614	0.0319035904374535 1.0039249503027e-06
3 (18)	0.1783037794745121 0.000457834126688901	0.9803293896819040 -0.00112920325728018	0.0319035906133066 9.98412939774784e-07

Tab. E.7: Differenz von RG-Schritten für  $N = 1, L = 1.01, \text{TOLF} = 10^{-8}$  und  $\text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 18, 19 bzw. 20.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1756472082138062	1.0000000000000000	0.0400000013670052
1 (20)	0.1756821545278829	0.9891681664679287	0.0408357003277712
1 (19)	0.1755744493055865 0.000613068655640393	0.9902464145144371 -0.00109005534454117	0.0408356673861252 8.06687426365953e-07
2 (20)	0.1757115044035093	0.9783850673645361	0.0416895469680439
2 (19)	0.1756086803009946 0.000585187081880331	0.9793866468666308 -0.00102370685684382	0.0416895117722795 8.44234753309279e-07
3 (20)	0.1757351473642859	0.9676511856652446	0.0425619635491920
3 (19)	0.1756369829952922 0.000558592691706647	0.9685814222049433 -0.000961334573324768	0.0425619283693939 8.26554866408243e-07

Tab. E.8: Differenz von RG-Schritten für  $N = 1, L = 1.01, \text{TOLF} = 10^{-8}$  und  $\text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 19 bzw. 20.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1705721125602722	1.0000000000000000	0.0599999994355520
1 (20)	0.1706306096844681	0.9848132885391039	0.0612748134719572
1 (19)	0.1705808223027190 0.000291784585668231	0.9852114966763598 -0.00040434886682591	0.0612747723731493 6.70729220863441e-07
1 (18)	0.1706069100155581 0.000138894591971655	0.9850899287928856 -0.000280906296656585	0.0612747665174344 7.66294014410521e-07
2 (20)	0.1706774566402690	0.9698431784105526	0.0625782649615290
2 (19)	0.1706304748673410 0.000275266422718161	0.9702061166667189 -0.000374223652076513	0.0625782281373192 5.88450476041148e-07
2 (18)	0.1706554594901566 0.000128881403235232	0.9700950382648966 -0.000259691319123187	0.0625782254643990 6.31163711896785e-07
3 (20)	0.1707126828778358	0.9550821862574775	0.0639110593813571
3 (19)	0.1706683450946422 0.000259721670623192	0.9554130213951504 -0.000346394417604244	0.0639110206875938 6.05431417959749e-07
3 (18)	0.1706922650519562 0.000119603450285066	0.9553116460792702 -0.000240251388932112	0.0639110209918060 6.00671487518219e-07

Tab. E.9: Differenz von RG-Schritten für  $N = 1, L = 1.01$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 18, 19 bzw. 20.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.1618040845870972	1.0000000000000000	0.0999999911897058
1 (20)	0.1618600715383805	0.9790363566808229	0.1021900513476597
1 (19)	0.1618465938464716 8.32675519095342e-05	0.9791169816903975 -8.23513948429439e-05	0.1021900094472993 4.10023870728621e-07
1 (18)	0.1618546782740121 3.33205361714524e-05	0.9791014506920761 -6.64878385863966e-05	0.1021900218267615 2.88882311035884e-07
2 (20)	0.1618960227516094	0.9584971948035071	0.1044323733714317
2 (19)	0.1618835445586398 7.70753521767471e-05	0.9585684568300626 -7.43476631354202e-05	0.1044323430249560 2.90584947117031e-07
2 (18)	0.1618911865613886 2.98721990731767e-05	0.9585553115065727 -6.06331488298838e-05	0.1044323348980161 3.68405067931441e-07
3 (20)	0.1619120154262077	0.9383672439654821	0.1067283721917681
3 (19)	0.1619004583368000 7.13788249579664e-05	0.9384303816233702 -6.72845927798033e-05	0.1067283494627490 2.12961358171473e-07
3 (18)	0.1619076776685617 2.6790832258966e-05	0.9384192007127973 -5.53693105224004e-05	0.1067283400514934 3.0114086859491e-07

Tab. E.10: Differenz von RG-Schritten für  $N = 1, L = 1.01$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 18, 19 bzw. 20.

### E.2.2 $N = 2$

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.2380388131141663	1.5000000000000000	0.0300000020522976
1 (16)	0.2377967556053068	1.4875375091740872	0.0306302624985822
1 (15)	0.2375434805925900 0.00106509027876386	1.5130532853377445 -0.0171530304320354	0.0306302123374653 1.63763261594086e-06
1 (14)	0.2377073411333608 0.000376012160966576	1.4909074849984547 -0.00226547283922849	0.0306302141723619 1.57772791876988e-06
2 (16)	0.2375499552787840	1.4746943005455797	0.0312743102122065
2 (15)	0.2373057451941417 0.00102803675275676	1.4991694248602707 -0.0165967443595843	0.0312742565300862 1.71649254420937e-06
2 (14)	0.2374631452695956 0.000365438962455346	1.4778624485177718 -0.00214834218252557	0.0312742629466050 1.51132354899059e-06
3 (16)	0.2372981433355563	1.4615074458170541	0.0319324685277525
3 (15)	0.2370628399449862 0.000991593896448489	1.4849675176124237 -0.016051968713888	0.0319324169030687 1.6166831497474e-06
3 (14)	0.2372138720533709 0.000355128282930632	1.4644851741315126 -0.00203743629427343	0.0319324214575090 1.47405589582359e-06

Tab. E.11: Differenz von RG-Schritten für  $N = 2, L = 1.01$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 14, 15 bzw. 16.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.2340217332839966	1.5000000000000000	0.0400000013838285
1 (16)	0.2337349754470745	1.4788592693185840	0.0408515017983736
1 (15)	0.2335552147807224 0.00076907902212015	1.4957312180181392 -0.0114087587978059	0.0408514384988362 1.54950331363046e-06
1 (14)	0.2336767871817175 0.000248949757072949	1.4804507540924932 -0.00107615701299451	0.0408514393681165 1.52822428440872e-06
2 (16)	0.2334393245941790	1.4578630592488970	0.0417220814536457
2 (15)	0.2332681103543941 0.000733442148543462	1.4738402987804902 -0.0109593554965476	0.0417220123494037 1.65629900493175e-06
2 (14)	0.2333830734493601 0.000240966876153689	1.4593428559576114 -0.00101504506841455	0.0417220186215408 1.50596764858776e-06
3 (16)	0.2331346166476492	1.4370148054431284	0.0426122052707682
3 (15)	0.2329716051592856 0.00069921614690949	1.4521416406626355 -0.01052656880236	0.0426121338219861 1.6767210625472e-06
3 (14)	0.2330802404584821 0.000233239447444545	1.4383910160414861 -0.00095768713943995	0.0426121413486951 1.5000883595155e-06

Tab. E.12: Differenz von RG-Schritten für  $N = 2, L = 1.01$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 16 bzw. 15.

Schritt	$\kappa / (\Delta\kappa/\kappa)$	$\lambda / (\Delta\lambda/\lambda)$	$m_r^2/(2d) / (\Delta m_r^2/m_r^2)$
0	0.2267782049179077	1.5000000000000000	0.0599999970776982
1 (16)	0.2264089469721730	1.4693019909061971	0.0613091507922885
1 (15)	0.2263114287263633 0.000430717280009621	1.4777407243124543 -0.00574336212602054	0.0613090693863044 1.32779500364148e-06
1 (14)	0.2263827758277291 0.00011559235972745	1.4697546232044321 -0.000308059405783448	0.0613090768171029 1.20659289256563e-06
2 (16)	0.2260241708249478	1.4392516563773907	0.0626489557861061
2 (15)	0.2259326226094804 0.000405037280452158	1.4471269099315880 -0.00547176966536857	0.0626488733140164 1.31641603063123e-06
2 (14)	0.2259990441992442 0.000111167870285317	1.4396591784821768 -0.000283148609195875	0.0626488767625379 1.26137087540287e-06
3 (16)	0.2256238322173548	1.4098233889599179	0.0640202097387095
3 (15)	0.2255379298274687 0.000380732784484134	1.4171726429409237 -0.00521288981198394	0.0640201268133568 1.29529961004571e-06
3 (14)	0.2255997070798912 0.000106926370439311	1.4101907596487475 -0.000260579226948889	0.0640201287535374 1.26499385804284e-06

Tab. E.13: Differenz von RG-Schritten für  $N = 2, L = 1.01$ , TOLF=  $10^{-8}$  und MR\_REL\_EPSILON=  $10^{-8}$ . Die Ordnung der LCE ist 16 bzw. 15.

## E.3 Flüsse

### E.3.1 $N = 1$

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.18028	0.8600	0.03500	-	-	-	-	-	-
0.18024	0.8572	0.03536	1.0022 2.229	1.0134 0.375	0.9890	0.1972	1.0687	L
0.18020	0.8544	0.03573	1.0034 1.488	1.0127 0.394	0.9907	0.1916	1.0797	L
0.18016	0.8515	0.03610	1.0044 1.127	1.0121 0.414	0.9924	0.1888	1.0913	L
0.18012	0.8486	0.03648	1.0055 0.913	1.0115 0.435	0.9940	0.1872	1.1035	L
0.18009	0.8457	0.03685	1.0065 0.773	1.0110 0.457	0.9956	0.1861	1.1163	L
0.18005	0.8427	0.03724	1.0074 0.673	1.0104 0.480	0.9970	0.1853	1.1298	L
0.18001	0.8397	0.03762	1.0083 0.600	1.0100 0.503	0.9984	0.1847	1.1441	L
0.17997	0.8367	0.03802	1.0092 0.544	1.0095 0.528	0.9997	0.1843	1.1590	L
0.17993	0.8336	0.03841	1.0100 0.499	1.0090 0.554	1.0010	0.1839	1.1748	R
0.17989	0.8305	0.03881	1.0108 0.463	1.0086 0.581	1.0022	0.1836	1.1914	R
0.17985	0.8274	0.03922	1.0116 0.434	1.0082 0.609	1.0033	0.1834	1.2088	R
0.17981	0.8243	0.03962	1.0123 0.409	1.0079 0.638	1.0044	0.1832	1.2272	R
0.17976	0.8211	0.04004	1.0129 0.389	1.0075 0.668	1.0054	0.1830	1.2465	R
0.17972	0.8179	0.04045	1.0135 0.372	1.0071 0.700	1.0063	0.1829	1.2669	R
0.17968	0.8147	0.04088	1.0141 0.357	1.0068 0.733	1.0072	0.1828	1.2884	R
0.17964	0.8115	0.04130	1.0146 0.344	1.0065 0.768	1.0080	0.1826	1.3109	R

Tab. E.14: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005$ , MR\_REL\_EPSILON =  $10^{-8}$ , TOLF =  $10^{-8}$ ; Start oberhalb der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.17960	0.8900	0.03500	-	-	-	-	-	-
0.17957	0.8869	0.03536	1.0066 0.758	1.0104 0.484	0.9963	0.1840	1.1938	L
0.17954	0.8837	0.03573	1.0080 0.627	1.0098 0.509	0.9982	0.1832	1.2098	L
0.17951	0.8805	0.03610	1.0093 0.539	1.0094 0.535	0.9999	0.1827	1.2267	L
0.17948	0.8772	0.03648	1.0105 0.476	1.0089 0.562	1.0016	0.1823	1.2444	R
0.17945	0.8739	0.03685	1.0117 0.428	1.0085 0.591	1.0032	0.1820	1.2632	R
0.17942	0.8706	0.03724	1.0128 0.392	1.0081 0.621	1.0047	0.1818	1.2830	R
0.17939	0.8673	0.03762	1.0138 0.363	1.0077 0.652	1.0061	0.1816	1.3039	R
0.17936	0.8640	0.03802	1.0148 0.339	1.0073 0.685	1.0074	0.1815	1.3260	R
0.17933	0.8606	0.03841	1.0157 0.320	1.0070 0.720	1.0087	0.1814	1.3493	R
0.17930	0.8572	0.03881	1.0165 0.304	1.0066 0.756	1.0098	0.1813	1.3739	R
0.17926	0.8538	0.03921	1.0173 0.291	1.0063 0.794	1.0109	0.1812	1.4000	R
0.17923	0.8503	0.03962	1.0180 0.280	1.0060 0.834	1.0119	0.1811	1.4275	R
0.17920	0.8469	0.04004	1.0186 0.271	1.0057 0.876	1.0128	0.1810	1.4566	R
0.17916	0.8434	0.04045	1.0192 0.263	1.0054 0.920	1.0137	0.1810	1.4875	R
0.17913	0.8399	0.04087	1.0197 0.256	1.0052 0.966	1.0144	0.1809	1.5202	R
0.17909	0.8364	0.04130	1.0202 0.250	1.0049 1.015	1.0152	0.1809	1.5548	R

Tab. E.15: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start auf der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.17867	0.9300	0.03500	-	-	-	-	-	-
0.17866	0.9264	0.03536	1.0225 0.225	1.0069 0.723	1.0154	0.1794	1.4554	R
0.17864	0.9227	0.03573	1.0243 0.208	1.0066 0.762	1.0176	0.1793	1.4842	R
0.17862	0.9190	0.03610	1.0259 0.195	1.0062 0.803	1.0196	0.1793	1.5149	R
0.17861	0.9153	0.03648	1.0274 0.185	1.0059 0.847	1.0213	0.1793	1.5475	R
0.17859	0.9116	0.03685	1.0286 0.177	1.0056 0.894	1.0229	0.1792	1.5822	R
0.17857	0.9078	0.03724	1.0297 0.170	1.0053 0.943	1.0243	0.1792	1.6191	R
0.17855	0.9040	0.03762	1.0307 0.165	1.0050 0.995	1.0255	0.1792	1.6584	R
0.17853	0.9002	0.03802	1.0315 0.161	1.0048 1.050	1.0266	0.1792	1.7004	R
0.17851	0.8964	0.03841	1.0321 0.158	1.0045 1.108	1.0275	0.1792	1.7451	R
0.17849	0.8926	0.03881	1.0327 0.155	1.0043 1.171	1.0283	0.1791	1.7930	R
0.17847	0.8888	0.03921	1.0331 0.153	1.0040 1.237	1.0289	0.1791	1.8442	R
0.17845	0.8849	0.03962	1.0334 0.152	1.0038 1.308	1.0295	0.1791	1.8991	R
0.17843	0.8810	0.04003	1.0336 0.151	1.0036 1.384	1.0299	0.1791	1.9581	R
0.17840	0.8771	0.04045	1.0337 0.150	1.0034 1.465	1.0302	0.1791	2.0215	R
0.17838	0.8732	0.04087	1.0338 0.150	1.0032 1.553	1.0305	0.1791	2.0897	R
0.17836	0.8693	0.04130	1.0338 0.150	1.0030 1.647	1.0307	0.1791	2.1635	R

Tab. E.16: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start unterhalb der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.18065	0.7800	0.04000	-	-	-	-	-	-
0.18060	0.7773	0.04042	1.0083 0.603	1.0104 0.483	0.9980	0.1872	1.0431	L
0.18055	0.7745	0.04084	1.0089 0.566	1.0099 0.506	0.9989	0.1868	1.0553	L
0.18049	0.7717	0.04126	1.0094 0.535	1.0095 0.529	0.9999	0.1864	1.0682	L
0.18044	0.7689	0.04170	1.0099 0.509	1.0091 0.552	1.0008	0.1861	1.0816	R
0.18038	0.7661	0.04213	1.0103 0.486	1.0087 0.577	1.0016	0.1859	1.0957	R
0.18032	0.7632	0.04257	1.0108 0.466	1.0083 0.603	1.0024	0.1856	1.1105	R
0.18027	0.7603	0.04302	1.0112 0.449	1.0079 0.630	1.0032	0.1855	1.1261	R
0.18021	0.7574	0.04347	1.0116 0.434	1.0076 0.657	1.0039	0.1853	1.1421	R
0.18015	0.7545	0.04392	1.0119 0.421	1.0073 0.687	1.0046	0.1851	1.1593	R
0.18009	0.7516	0.04438	1.0123 0.409	1.0070 0.717	1.0053	0.1850	1.1772	R
0.18003	0.7486	0.04484	1.0126 0.399	1.0067 0.748	1.0059	0.1849	1.1959	R
0.17997	0.7456	0.04531	1.0129 0.389	1.0064 0.781	1.0064	0.1847	1.2156	R
0.17991	0.7426	0.04579	1.0132 0.381	1.0061 0.815	1.0070	0.1846	1.2363	R
0.17984	0.7396	0.04627	1.0134 0.374	1.0059 0.851	1.0075	0.1845	1.2579	R
0.17978	0.7365	0.04675	1.0137 0.367	1.0056 0.888	1.0080	0.1845	1.2807	R
0.17972	0.7334	0.04724	1.0139 0.361	1.0054 0.927	1.0085	0.1844	1.3046	R

Tab. E.17: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start oberhalb der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.18044	0.7900	0.04000	-	-	-	-	-	-
0.18039	0.7872	0.04042	1.0093 0.541	1.0095 0.525	0.9997	0.1860	1.0873	L
0.18034	0.7843	0.04084	1.0098 0.510	1.0091 0.549	1.0007	0.1857	1.1011	R
0.18029	0.7814	0.04126	1.0103 0.485	1.0087 0.574	1.0016	0.1854	1.1157	R
0.18024	0.7785	0.04170	1.0108 0.463	1.0083 0.601	1.0025	0.1852	1.1310	R
0.18018	0.7756	0.04213	1.0113 0.444	1.0080 0.628	1.0033	0.1850	1.1470	R
0.18013	0.7726	0.04257	1.0117 0.427	1.0076 0.656	1.0041	0.1848	1.1638	R
0.18007	0.7696	0.04302	1.0122 0.413	1.0073 0.686	1.0048	0.1846	1.1815	R
0.18002	0.7666	0.04347	1.0125 0.400	1.0070 0.716	1.0055	0.1845	1.2000	R
0.17996	0.7636	0.04392	1.0129 0.389	1.0067 0.748	1.0062	0.1844	1.2195	R
0.17991	0.7605	0.04438	1.0132 0.379	1.0064 0.782	1.0068	0.1842	1.2401	R
0.17985	0.7575	0.04484	1.0136 0.370	1.0061 0.816	1.0074	0.1841	1.2611	R
0.17979	0.7544	0.04531	1.0139 0.362	1.0059 0.853	1.0080	0.1840	1.2839	R
0.17973	0.7513	0.04579	1.0141 0.355	1.0056 0.891	1.0085	0.1840	1.3076	R
0.17967	0.7481	0.04627	1.0144 0.349	1.0054 0.931	1.0090	0.1839	1.3326	R
0.17961	0.7450	0.04675	1.0146 0.344	1.0051 0.973	1.0094	0.1838	1.3588	R
0.17955	0.7418	0.04724	1.0148 0.339	1.0049 1.016	1.0099	0.1838	1.3864	R

Tab. E.18: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start auf der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.18023	0.8000	0.04000	-	-	-	-	-	-
0.18018	0.7971	0.04042	1.0104 0.483	1.0088 0.572	1.0016	0.1849	1.1366	R
0.18013	0.7941	0.04084	1.0109 0.458	1.0084 0.599	1.0026	0.1847	1.1524	R
0.18008	0.7911	0.04126	1.0115 0.437	1.0080 0.627	1.0035	0.1844	1.1690	R
0.18003	0.7881	0.04170	1.0120 0.419	1.0076 0.655	1.0043	0.1843	1.1865	R
0.17998	0.7850	0.04213	1.0124 0.403	1.0073 0.685	1.0051	0.1841	1.2048	R
0.17993	0.7820	0.04257	1.0129 0.390	1.0070 0.717	1.0059	0.1840	1.2240	R
0.17988	0.7789	0.04302	1.0133 0.378	1.0067 0.749	1.0066	0.1838	1.2442	R
0.17983	0.7758	0.04346	1.0137 0.367	1.0064 0.783	1.0072	0.1837	1.2655	R
0.17977	0.7726	0.04392	1.0140 0.358	1.0061 0.819	1.0079	0.1836	1.2879	R
0.17972	0.7695	0.04438	1.0144 0.350	1.0058 0.856	1.0085	0.1835	1.3114	R
0.17967	0.7663	0.04484	1.0147 0.343	1.0056 0.895	1.0090	0.1835	1.3362	R
0.17961	0.7631	0.04531	1.0149 0.336	1.0053 0.936	1.0096	0.1834	1.3622	R
0.17955	0.7599	0.04579	1.0152 0.331	1.0051 0.979	1.0100	0.1833	1.3900	R
0.17950	0.7567	0.04627	1.0154 0.326	1.0049 1.023	1.0105	0.1833	1.4183	R
0.17944	0.7535	0.04675	1.0157 0.321	1.0047 1.071	1.0109	0.1832	1.4491	R
0.17938	0.7502	0.04724	1.0158 0.317	1.0045 1.120	1.0113	0.1832	1.4813	R

Tab. E.19: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start unterhalb der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.18150	0.6700	0.04500	-	-	-	-	-	-
0.18142	0.6678	0.04547	1.0079 0.637	1.0121 0.415	0.9958	0.1919	0.8524	L
0.18134	0.6656	0.04595	1.0081 0.616	1.0116 0.432	0.9966	0.1915	0.8601	L
0.18126	0.6633	0.04643	1.0084 0.597	1.0111 0.450	0.9973	0.1912	0.8682	L
0.18117	0.6610	0.04692	1.0086 0.580	1.0107 0.469	0.9980	0.1909	0.8766	L
0.18109	0.6587	0.04741	1.0089 0.564	1.0103 0.487	0.9986	0.1907	0.8853	L
0.18100	0.6564	0.04791	1.0091 0.550	1.0099 0.507	0.9992	0.1904	0.8944	L
0.18092	0.6540	0.04841	1.0093 0.537	1.0095 0.527	0.9998	0.1902	0.9039	L
0.18083	0.6517	0.04892	1.0095 0.526	1.0091 0.548	1.0004	0.1900	0.9138	R
0.18074	0.6493	0.04943	1.0097 0.515	1.0088 0.569	1.0009	0.1898	0.9241	R
0.18065	0.6468	0.04995	1.0099 0.505	1.0085 0.591	1.0014	0.1896	0.9348	R
0.18057	0.6444	0.05048	1.0101 0.496	1.0082 0.614	1.0019	0.1895	0.9460	R
0.18048	0.6419	0.05101	1.0103 0.488	1.0078 0.638	1.0024	0.1893	0.9577	R
0.18039	0.6395	0.05155	1.0104 0.481	1.0076 0.662	1.0028	0.1892	0.9698	R
0.18029	0.6370	0.05209	1.0106 0.474	1.0073 0.688	1.0033	0.1891	0.9824	R
0.18020	0.6345	0.05264	1.0107 0.468	1.0070 0.714	1.0037	0.1889	0.9956	R
0.18011	0.6319	0.05320	1.0109 0.462	1.0068 0.741	1.0041	0.1888	1.0093	R

Tab. E.20: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start oberhalb der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.18095	0.7000	0.04500	-	-	-	-	-	-
0.18087	0.6975	0.04547	1.0093 0.539	1.0096 0.523	0.9997	0.1889	0.9610	L
0.18080	0.6950	0.04595	1.0096 0.523	1.0092 0.545	1.0004	0.1887	0.9721	R
0.18072	0.6924	0.04643	1.0099 0.509	1.0088 0.567	1.0010	0.1884	0.9835	R
0.18065	0.6899	0.04692	1.0101 0.496	1.0085 0.590	1.0016	0.1883	0.9955	R
0.18057	0.6873	0.04741	1.0104 0.484	1.0082 0.614	1.0022	0.1881	1.0080	R
0.18049	0.6846	0.04791	1.0106 0.474	1.0078 0.639	1.0027	0.1879	1.0210	R
0.18041	0.6820	0.04841	1.0108 0.464	1.0075 0.665	1.0033	0.1878	1.0347	R
0.18033	0.6794	0.04892	1.0110 0.455	1.0072 0.692	1.0037	0.1876	1.0489	R
0.18025	0.6767	0.04943	1.0112 0.448	1.0070 0.719	1.0042	0.1875	1.0638	R
0.18017	0.6740	0.04995	1.0114 0.440	1.0067 0.748	1.0047	0.1874	1.0793	R
0.18009	0.6713	0.05048	1.0116 0.434	1.0064 0.778	1.0051	0.1873	1.0955	R
0.18001	0.6685	0.05101	1.0117 0.428	1.0062 0.809	1.0055	0.1872	1.1124	R
0.17992	0.6658	0.05155	1.0119 0.422	1.0059 0.841	1.0059	0.1871	1.1301	R
0.17984	0.6630	0.05209	1.0120 0.418	1.0057 0.874	1.0063	0.1870	1.1485	R
0.17975	0.6603	0.05264	1.0121 0.413	1.0055 0.909	1.0066	0.1869	1.1678	R
0.17966	0.6575	0.05320	1.0123 0.409	1.0053 0.945	1.0069	0.1868	1.1880	R

Tab. E.21: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start auf der kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.17955	0.7700	0.04500	-	-	-	-	-	-
0.17949	0.7668	0.04547	1.0157 0.321	1.0050 1.002	1.0106	0.1830	1.4192	R
0.17944	0.7635	0.04595	1.0159 0.316	1.0048 1.048	1.0111	0.1830	1.4495	R
0.17938	0.7602	0.04643	1.0161 0.312	1.0046 1.097	1.0115	0.1829	1.4820	R
0.17932	0.7569	0.04692	1.0163 0.308	1.0044 1.148	1.0119	0.1829	1.5150	R
0.17927	0.7536	0.04741	1.0165 0.305	1.0042 1.202	1.0123	0.1828	1.5513	R
0.17921	0.7503	0.04791	1.0167 0.302	1.0040 1.259	1.0126	0.1828	1.5891	R
0.17915	0.7470	0.04841	1.0168 0.299	1.0038 1.319	1.0130	0.1828	1.6293	R
0.17909	0.7437	0.04892	1.0169 0.297	1.0036 1.383	1.0133	0.1828	1.6718	R
0.17902	0.7403	0.04943	1.0170 0.295	1.0034 1.450	1.0135	0.1827	1.7169	R
0.17896	0.7369	0.04995	1.0171 0.294	1.0033 1.521	1.0138	0.1827	1.7648	R
0.17890	0.7336	0.05048	1.0172 0.292	1.0031 1.596	1.0140	0.1827	1.8158	R
0.17883	0.7302	0.05101	1.0173 0.291	1.0030 1.676	1.0142	0.1827	1.8701	R
0.17877	0.7268	0.05154	1.0173 0.290	1.0028 1.761	1.0144	0.1827	1.9280	R
0.17870	0.7234	0.05209	1.0174 0.290	1.0027 1.852	1.0146	0.1827	1.9898	R
0.17863	0.7200	0.05264	1.0174 0.289	1.0026 1.948	1.0148	0.1827	2.0559	R
0.17856	0.7165	0.05319	1.0174 0.289	1.0024 2.052	1.0149	0.1826	2.1269	R

Tab. E.22: Trajektorie für  $N = 1, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start unterhalb der kritischen Trajektorie

### E.3.2 $N = 2$

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.23792	1.5600	0.03000	-	-	-	-	-	-
0.23780	1.5529	0.03031	1.0101 0.495	1.0123 0.409	0.9979	0.2494	2.1351	L
0.23769	1.5458	0.03063	1.0103 0.485	1.0115 0.438	0.9989	0.2491	2.1765	L
0.23757	1.5386	0.03095	1.0105 0.476	1.0107 0.469	0.9998	0.2489	2.2214	L
0.23745	1.5313	0.03128	1.0107 0.468	1.0100 0.502	1.0007	0.2487	2.2700	R
0.23733	1.5239	0.03160	1.0109 0.461	1.0093 0.538	1.0016	0.2486	2.3228	R
0.23721	1.5165	0.03194	1.0110 0.454	1.0087 0.576	1.0023	0.2484	2.3801	R
0.23708	1.5089	0.03227	1.0112 0.448	1.0081 0.618	1.0031	0.2483	2.4426	R
0.23696	1.5014	0.03261	1.0113 0.443	1.0076 0.663	1.0037	0.2481	2.5106	R
0.23683	1.4938	0.03295	1.0114 0.438	1.0070 0.711	1.0044	0.2480	2.5850	R
0.23670	1.4861	0.03330	1.0116 0.434	1.0065 0.764	1.0050	0.2479	2.6664	R
0.23657	1.4783	0.03365	1.0117 0.430	1.0061 0.822	1.0055	0.2478	2.7558	R
0.23644	1.4706	0.03400	1.0118 0.427	1.0057 0.885	1.0061	0.2477	2.8542	R
0.23631	1.4627	0.03436	1.0118 0.423	1.0052 0.954	1.0066	0.2476	2.9630	R
0.23618	1.4549	0.03472	1.0119 0.421	1.0049 1.031	1.0070	0.2475	3.0836	R
0.23604	1.4470	0.03509	1.0120 0.418	1.0045 1.115	1.0075	0.2475	3.2179	R
0.23590	1.4390	0.03546	1.0121 0.416	1.0041 1.210	1.0079	0.2474	3.3681	R

Tab. E.23: Trajektorie für  $N = 2, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start oberhalb des Kandidaten für die kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.23787	1.5800	0.03000	-	-	-	-	-	-
0.23776	1.5726	0.03031	1.0104 0.482	1.0110 0.455	0.9994	0.2488	2.2488	L
0.23764	1.5652	0.03063	1.0106 0.472	1.0103 0.488	1.0003	0.2486	2.2980	R
0.23753	1.5577	0.03095	1.0108 0.464	1.0096 0.524	1.0012	0.2484	2.3514	R
0.23741	1.5501	0.03128	1.0110 0.456	1.0089 0.562	1.0021	0.2483	2.4095	R
0.23729	1.5424	0.03160	1.0112 0.449	1.0083 0.603	1.0028	0.2481	2.4729	R
0.23717	1.5347	0.03194	1.0113 0.443	1.0077 0.648	1.0036	0.2479	2.5420	R
0.23705	1.5269	0.03227	1.0115 0.438	1.0072 0.696	1.0042	0.2478	2.6176	R
0.23692	1.5190	0.03261	1.0116 0.433	1.0067 0.749	1.0049	0.2477	2.7005	R
0.23680	1.5111	0.03295	1.0117 0.428	1.0062 0.806	1.0055	0.2476	2.7917	R
0.23667	1.5032	0.03330	1.0118 0.424	1.0058 0.869	1.0060	0.2475	2.8922	R
0.23654	1.4952	0.03365	1.0119 0.421	1.0053 0.939	1.0066	0.2474	3.0034	R
0.23642	1.4872	0.03400	1.0120 0.417	1.0049 1.016	1.0071	0.2473	3.1269	R
0.23628	1.4791	0.03436	1.0121 0.414	1.0045 1.101	1.0075	0.2472	3.2646	R
0.23615	1.4710	0.03472	1.0122 0.412	1.0042 1.196	1.0080	0.2471	3.4190	R
0.23602	1.4628	0.03509	1.0123 0.410	1.0038 1.302	1.0084	0.2471	3.5929	R
0.23588	1.4547	0.03546	1.0123 0.408	1.0035 1.422	1.0088	0.2470	3.7901	R

Tab. E.24: Trajektorie für  $N = 2, L = 1.005, \text{MR\_REL\_EPSILON} = 10^{-8}, \text{TOLF} = 10^{-8}$ ; Start auf dem Kandidaten für die kritischen Trajektorie

$\kappa$	$\lambda$	$m_r^2/(2d)$	$\gamma_\kappa, \nu_\kappa$	$\gamma_\lambda, \nu_\lambda$	$\gamma_\kappa/\gamma_\lambda$	$\kappa_*$	$\lambda_*$	Kr.
0.23782	1.6000	0.03000	-	-	-	-	-	-
0.23771	1.5923	0.03031	1.0107 0.468	1.0098 0.511	1.0009	0.2483	2.3826	R
0.23760	1.5846	0.03063	1.0109 0.459	1.0091 0.549	1.0018	0.2481	2.4417	R
0.23748	1.5767	0.03095	1.0111 0.451	1.0085 0.590	1.0026	0.2479	2.5062	R
0.23737	1.5688	0.03128	1.0113 0.444	1.0079 0.634	1.0034	0.2478	2.5767	R
0.23725	1.5609	0.03160	1.0115 0.437	1.0073 0.683	1.0041	0.2476	2.6539	R
0.23713	1.5529	0.03194	1.0116 0.431	1.0068 0.735	1.0048	0.2475	2.7387	R
0.23701	1.5448	0.03227	1.0118 0.426	1.0063 0.793	1.0054	0.2473	2.8320	R
0.23689	1.5367	0.03261	1.0119 0.422	1.0058 0.856	1.0060	0.2472	2.9351	R
0.23676	1.5285	0.03295	1.0120 0.418	1.0054 0.926	1.0066	0.2471	3.0493	R
0.23664	1.5203	0.03330	1.0121 0.414	1.0050 1.003	1.0071	0.2470	3.1764	R
0.23651	1.5120	0.03365	1.0122 0.411	1.0046 1.089	1.0076	0.2470	3.3185	R
0.23639	1.5037	0.03400	1.0123 0.408	1.0042 1.185	1.0081	0.2469	3.4780	R
0.23626	1.4954	0.03436	1.0124 0.405	1.0039 1.293	1.0085	0.2468	3.6581	R
0.23613	1.4870	0.03472	1.0125 0.403	1.0035 1.415	1.0089	0.2468	3.8628	R
0.23599	1.4787	0.03509	1.0125 0.401	1.0032 1.554	1.0093	0.2467	4.0973	R

Tab. E.25: Trajektorie für  $N = 2, L = 1.005$ , MR\_REL\_EPSILON =  $10^{-8}$ , TOLF =  $10^{-8}$ ; Start unterhalb des Kandidaten für die kritischen Trajektorie

# ANHANG F

---

## Notation

---

$\mathbb{N}$	Die natürlichen Zahlen $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$
$\mathbb{N}_1$	$\mathbb{N} \setminus \{0\}$
$\mathbb{R}$	Die reellen Zahlen
$\mathbb{R}_{\geq a}$	$a$ eine reelle Zahl: Die reellen Zahlen $\geq a$ .
$\mathbb{C}$	Die komplexen Zahlen
$A^B$	$A, B$ Mengen: Der Menge aller Abbildungen $B \rightarrow A$
$\mathbb{M}$	Der Minkowski-Raum mit der Metrik $\text{diag}(1, -1, -1, \dots)$ .
$\mathbb{I}$	Der Einheits-Operator
$\langle \dots \rangle$	Der Erwartungswert bzgl. des betrachteten Maßes
$\langle \dots \rangle^0$	Der Erwartungswert der ultralokalen Theorie
$\langle \dots \rangle_0$	Der Erwartungswert der Gaußschen Theorie
$\langle \dots \rangle_J$	Der Erwartungswert mit äußerer Quelle $J$
$\langle \dots ; \dots ; \dots \rangle_c$	Die Kumulante oder der trunkierte oder zusammenhängende Erwartungswert; sind keine „;“ angegeben, so ist implizit zwischen allen Faktoren eines anzunehmen.
$\langle \dots ; \dots ; \dots \rangle^{1PI}$	Die Vertexfunktion oder 1PI-Erwartungswert
$G_n, G_{n,a_1, \dots, a_n}$	Die Greensche Funktion. $G_n(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle$
$G_n^c, G_{n,a_1, \dots, a_n}^c$	Die Kumulante oder trunkierte Greensche Funktion. $G_n^c(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1); \dots; \phi(x_n) \rangle_c$
$\Gamma_n = \Gamma_{n,a_1, \dots, a_n}$	Die Vertexfunktion oder 1PI Greensche Funktion. $\Gamma_n(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1); \dots; \phi(x_n) \rangle^{1PI}$

$\delta_{x_1, \dots, x_n}$  ist 1, wenn alle  $x_i$  gleich sind und 0 sonst.  
 $O(N)$  Die orthogonale Gruppe für  $N$  Dimensionen.

---

## Literaturverzeichnis

---

- [AHK76] S. A. Albeverio and R. J. Høegh-Krohn, *Mathematical theory of Feynman path integrals*, Lecture Notes in Mathematics, vol. 523, Springer Verlag, 1976.
- [Ami84] D. J. Amit, *Field theory, the renormalization group, and critical phenomena*, World Scientific, 1984.
- [AS84] M. Abramowitz and I. A. Stegun (eds.), *Pocketbook of mathematical functions, abridged edition of handbook of mathematical functions*, Verlag Harri Deutsch, 1984.
- [Bak75] G. A. Baker, jr., *Self-interacting, boson, quantum, field theory and the thermodynamic limit in  $d$  dimensions*, J. of Math. Phys. **16** (1975), no. 6, 1324–1346.
- [Bau91] H. Bauer, *Wahrscheinlichkeitstheorie*, de Gruyter Lehrbuch, 1991.
- [BC97] P. Butera and M. Comi,  *$n$ -vector spin models on the sc and the bcc lattices: a study of the critical behavior of the susceptibility and of the correlation length by high temperature series extended to order  $\beta^{21}$* , hep-lat/9703018, Phys. Rev. B **56** (1997), 8212.
- [BDFN98] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, and M.E.J Newman, *The theory of critical phenomena, an introduction to the renormalization group*, Oxford University Press, 1998.
- [BFMM<sup>+</sup>99] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, *Scaling corrections: site-percolation and Ising model in three dimensions*, cond-mat/9805125, J. Phys. A: Math. Gen. **32** (1999), 1–13.

- [BFMMS98] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, and A. Muñoz Sudupe, *Finite size scaling and “perfect” actions: the three dimensional Ising model*, hep-lat/9805022, Phys. Lett. B **441** (1998), 330–338.
- [BG95] G. Benfatto and G. Gallavotti, *Renormalization group*, Princeton University Press, 1995.
- [BLH95] H.W.J. Blöte, E. Luijten, and J. R. Heringa, *Ising universality in three dimensions: A monte carlo study*, cond-mat/9509016, J. Phys. A: Math. Gen. **28** (1995), 6289–6313.
- [BLT75] N.N. Bogolubov, A.A. Logunov, and I.T. Todorov, *Introduction to axiomatic quantum field theory*, Mathematical Physics Monograph Series, vol. 18, W.A. Benjamin, Inc., 1975.
- [BM94] J. C. Baez and J. P. Muniain, *Gauge fields, knots and gravity*, Series on Knots and Everything, vol. 4, World Scientific, 1994.
- [Bry84] D.C. Brydges, *A short course on cluster expansions*, Phénomènes Critiques, Systèmes Aléatoires, Théories de Jauge / Critical Phenomena, Random Systems, Gauge Theories (Les Houches summer school, Session XLIII) (K. Osterwalder and R. Stora, eds.), vol. I, North Holland, 1984.
- [BS79] H. W. J. Blöthe and R. H. Swendsen, *Critical behavior of the three-dimensional Ising model*, Phys. Rev. B **20** (1979), 2077–2087.
- [BSZ91] J. C. Baez, I. E. Segal, and Z. Zhou, *Introduction to algebraic and constructive quantum field theory*, Princeton University Press, 1991.
- [Buc98] D. Buchholz, *Current trends in axiomatic quantum field theory*, hep-th/9811233 (1998).
- [BW74] T. L. Bell and K. G. Wilson, *Nonlinear renormalization groups*, Phys. Rev. B **10** (1974), 3935–3944.
- [BW75] T. L. Bell and K. G. Wilson, *Finite-lattice approximations to renormalization groups*, Phys. Rev. B **11** (1975), 3431–3444.
- [Cao99] T. Cao (ed.), *Foundations of quantum field theory*, Cambridge University Press, 1999.
- [CBS79] R. F. Chang, H. Barstyn, and J. V. Sengers, *Correlation function near the critical mixing point of a binary liquid*, Phys. Rev. A **19** (1979), 866.
- [CI73] P. Colella and O. E. Lanford III, *Sample field behavior for the free markov random field*, Constructive Quantum Field Theory (G. Velo and A. Wightman, eds.), Lecture Notes in Physics, vol. 25, Springer Verlag, 1973.

- [CPRV99a] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, *High-precision determination of the critical exponents for the  $\lambda$ -transition of  $^4\text{He}$  by improved high-temperature expansion*, cond-mat/9905395, IFUPP-TH 27/99 (1999).
- [CPRV99b] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, *Improved high-temperature expansion and critical equation of state of three-dimensional Ising-like systems*, cond-mat/9905078, IFUP-TH 22/99, ROM 99/1253 (1999).
- [DL76] C. Domb and J.L. Lebowitz, *Phase transitions and critical phenomena*, vol. 14, Academic Press, 1976.
- [Dob96] R.L. Dobrushin, *Estimates of semi-invariants for the Ising model at low temperatures*, Topics in Statistical and Theoretical Physics, Ser. 2 (R.L. Dobrushin, ed.), vol. 177, American Mathematical Society, 1996.
- [EG73] H. Epstein and V. Glaser, *The role of locality in perturbation theory*, Ann. Inst. H. Poincaré **19** (1973), 211–295.
- [Fey48] R. P. Feynman, *Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics*, Rev. Mod. Phys. **20** (1948), 367–387.
- [Fey49a] R. P. Feynman, *Space-time approach to quantum elektrodynamics*, Phys. Rev. **76** (1949), 769–789.
- [Fey49b] R. P. Feynman, *The theory of positrons*, Phys. Rev. **76** (1949), 749–759.
- [Fey50] R. P. Feynman, *Mathematical formulation of the quantum theory of electromagnetic interaction*, Phys. Rev. **80** (1950), 440–457.
- [Fey53a] R. P. Feynman, *Atomic theory of the  $\lambda$  transition in helium*, Phys. Rev. **91** (1953), 1291–1301.
- [Fey53b] R. P. Feynman, *Atomic theory of the liquid helium near absolute zero*, Phys. Rev. **91** (1953), 1301–1308.
- [Fey98] R. P. Feynman, *Statistical mechanics, a set of lectures*, Addison-Wesley, Advanced Book Classics, 1998.
- [FFS92] R. Fernández, J. Fröhlich, and A. D. Sokal, *Random walks, critical phenomena, and triviality in quantum field theory*, Springer Verlag, 1992.
- [FH65] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, McGraw-Hill Book Company, 1965.
- [FL91] A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, *Monte-carlo results for the  $d = 3$  Ising model*, Phys. Rev. B **44** (1991), 5081.

- [Fre85] M. Freidlin, *Functional integration and partial differential equations*, Annals of Mathematics Studies, vol. 109, Princeton University Press, 1985.
- [GA92] L. S. Goldner and G. Ahlers, *Superfluid fraction of  $^4\text{He}$  very close to  $t_\lambda$* , Phys. Rev. B **45** (1992), no. 22, 13129–13132.
- [GJ87] J. Glimm and A. Jaffe, *Quantum physics, a functional integral point of view*, second ed., Springer Verlag, 1987.
- [GKM96] C. Gutsfeld, J. Küster, and G. Münster, *Calculation of universal amplitude ratios in three-loop order*, cond-mat/9606091, Nucl. Phys. B **479** (1996), 654.
- [GR57] I. S. Gradstein and I. M. Ryshik, *Tables of series, products, and integrals*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1957.
- [Gro88] S. Großmann, *Funktionalanalysis*, Aula-Verlag GmbH, 1988.
- [GS96] J. Göttker-Schnetmann, *Analytische und numerische Untersuchungen hierarchischer Renormierungsgruppenfixpunkte am Beispiel  $O(N)$ -invariante Modelle*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 1996.
- [Gut89] A. J. Guttmann, *Asymptotic analysis of power-series expansions*, Phase transition and critical phenomena (C. Domb and J.L. Lebowitz, eds.), vol. 13, Academic Press, 1989, pp. 1–234.
- [GW64] I. M. Gelfand and N. J. Wilenkin, *Verallgemeinerte Funktionen (Distributionen) iv*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1964.
- [GZJ98] R. Guida and J. Zinn-Justin, *Critical exponents of the  $n$ -vector model*, cond-mat/9803240, ShT-t97/040 (1998).
- [Haa93] R. Haag, *Local quantum physics*, Springer Verlag, 1993.
- [Has99] M. Hasenbusch, *A monte carlo study of leading order scaling corrections of  $\phi^4$  theory on a three dimensional lattice*, hep-lat/9902026, J.Phys. A **32** (1999), 4851–4865.
- [HKFK89] K. Hamano, T. Kaneko, K. Fukuoka, and N. Kuwahara, Int. J. Thermophys. **10** (1989), 389.
- [HM94] J. Heitger and G. Münster, *Field-theoretic calculation of the universial amplitude ratio of correlation lengths in 3d-Ising systems*, cond-mat/9402017, Nucl. Phys. B **424** (1994), 582.
- [HM98] P. Hoppe and G. Münster, *The interface tension of the three-dimensional Ising model in two-loop order*, cond-mat/9708212, Phys. Letters A **238** (1998), 265.

- [HPV98] M. Hasenbusch, K. Pinn, and S. Vinti, *Critical exponents of the 3d Ising universality class from finite size scaling with standard and improved actions*, hep-lat/9806012, HUB-EP-98/31, MS-TPI-98-10 (1998).
- [HT99] M. Hasenbusch and T. Török, *High precision monte carlo study of the 3d xy-universality class*, cond-mat/9904408, HUB-EP-99/18 (1999).
- [Hua87] K. Huang, *Statistical mechanics*, second ed., John Wiley & Sons, 1987.
- [ID89] C. Itzykson and J. Drouffe, *Statistical field theory*, vol. 2, Cambridge University Press, 1989.
- [IZ80] C. Itzykson and J. Zuber, *Quantum field theory*, McGraw-Hill International Editions, 1980.
- [Jaf65] A. Jaffe, *Divergence of perturbation theory for bosons*, Comm. Math. Phys. **1** (1965), 127–149.
- [JK99] F. Jasch and H. Kleinert, *Fast-convergent resummation algorithm and critical exponents of  $\phi^4$ -theory in three dimensions*, cond-mat/9906246 (1999).
- [Kle99] H. Kleinert, *Theory and satellite experiment for critical exponent  $\alpha$  of  $\lambda$ -transition in superfluid helium*, cond-mat/9906107 (1999).
- [kM76] S. k. Ma, *Renormalization group by monte carlo methods*, Phys. Rev. Lett. **37** (1976), 461–464.
- [KP86] R. Kotecký and D. Preiss, *Cluster expansion for abstract polymer models*, Commun. Math. Phys. **103** (1986), 491–498.
- [Kuo75] H. Kuo, *Gaussian measures in banach spaces*, Lecture Notes in Mathematics, vol. 463, Springer Verlag, 1975.
- [LSN<sup>+</sup>96] J. A. Lipa, D. R. Swanson, J. A. Nissen, T. C. P Chui, and U. E. Israelsson, *Heat capacity and thermal relaxation of bulk helium very near the lambda point*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996), no. 6, 944–947.
- [LW87] M. Lüscher and P. Weisz, *Scaling laws and triviality bounds in the lattice  $\phi^4$  theory (i.) one-component model in the symmetric phase*, Nuclear Physics B **290** (1987), 25–60.
- [LW88a] M. Lüscher and P. Weisz, *Application of the linked cluster expansion to the n-component  $\phi^4$  theory*, Nuclear Physics B **300** (1988), 325–359.
- [LW88b] M. Lüscher and P. Weisz, *Scaling laws and triviality bounds in the lattice  $\phi^4$  theory (ii.) one-component model in the phase with spontaneous symmetry breaking*, Nuclear Physics B **295** (1988), 65–92.

- [LW89] M. Lüscher and P. Weisz, *Scaling laws and triviality bounds in the lattice  $\phi^4$  theory (iii.) n-component model*, Nuclear Physics B **318** (1989), 705.
- [MM94] I. Montvay and G. Münster, *Quantum fields on a lattice*, Cambridge University Press, 1994.
- [MOR97] H. Meyer-Ortmanns and T. Reisz, *Critical phenomena with convergent series expansions in a finite volume*, J. Stat. Phys. **87** (1997), 755–798.
- [MTV99] J.M. Mourão, T. Thiemann, and J.M. Velhinho, *Physical properties of quantum field theory measures*, hep-th/9711139, J. Math. Phys. **40** (1999), 2337–2353.
- [Mün81] G. Münster, *High-temperature expansions for the free energy of vortices and the string tension in lattice gauge theories*, Nucl. Phys. B **180** (1981), 23–60.
- [Nel73] E. Nelson, *Probability theory and euclidean field theory*, Constructive Quantum Field Theory (G. Velo and A. Wightman, eds.), Lecture Notes in Physics, vol. 25, Springer Verlag, 1973.
- [NvL76] Th. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, *Renormalization theory for Ising-like spin systems*, Phase transition and critical phenomena (C. Domb and M.S. Green, eds.), vol. 6, Academic Press, 1976, pp. 425–505.
- [OS73] K. Osterwalder and R. Schrader, *Axioms for euclidean green's functions*, Commun. Math. Phys. **31** (1973), 83–112.
- [Par88] G. Parisi, *Statistical field theory*, Addison-Wesley, 1988.
- [Pin99] K. Pinn, private communication, 1999.
- [Por85] A. Pordt, *Mayer expansion for euclidean lattice field theory: Convergence properties and relation with perturbation theory*, Preprint DESY 85-103, Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, 1985.
- [Por90] A. Pordt, *Convergent multigrid polymer expansions and renormalization for euclidean field theory*, Preprint DESY-90-020, Deutsches Elektronen Synchrotron, 3 1990.
- [Por93] A. Pordt, *Renormalization theory for hierarchical models*, Helvetica Physica Acta **66** (1993), 105–154.
- [Por96] A. Pordt, *A convergence proof for linked cluster expansions*, hep-lat/9604010, MS-TPI-96-05 (1996).
- [Por97] A. Pordt, *Scaling relations and renormalization group*, unpublished notes, 1997.

- [Por98] A. Pordt, *Polymer expansion in particle physics*, Field Theoretical Tools for Polymer and Particle Physics (H. Meyer-Ortmanns and A. Klümper, eds.), Springer Verlag, 1998, pp. 45–67.
- [PR97a] A. Pordt and T. Reisz, *Linked cluster expansions beyond nearest neighbor interactions: Convergence and graph classes*, hep-lat/9604021, Int. J. Mod. Phys. A **12** (1997), 3739–3757.
- [PR97b] A. Pordt and T. Reisz, *Notes on renormalization group and linked cluster expansions*, private notes, 1997.
- [PT77] P. Pfeuty and G. Toulouse, *Introduction to the renormalization group and to critical phenomena*, John Wiley & Sons, 1977.
- [PTVF92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical recipes, the art of scientific computing*, Cambridge University Press, 1992.
- [Rei95a] T. Reisz, *Advanced linked cluster expansion. Scalar fields at finite temperature*, hep-lat/9505023, Nucl.Phys.B **450** (1995), 569–602.
- [Rei95b] T. Reisz, *High temperature critical  $O(N)$  field models by LCE series*, Physics Letters B **360** (1995), 77–82.
- [Rei98a] T. Reisz, *The gross neveu model and QCDs chiral phase transition*, Field Theoretical Tools for Polymer and Particle Physics (H. Meyer-Ortmanns and A. Klümper, eds.), Springer Verlag, 1998, pp. 192–230.
- [Rei98b] T. Reisz, *Hopping parameter series construction for models with non-trivial vacuum*, Nuclear Physics B **527** (1998), 363–380.
- [Rei98c] T. Reisz, *RG: Renormalization group, more general block spin transformations*, private notes, 1998.
- [Rei99] T. Reisz, private communication, 1999.
- [Riv91] V. Rivasseau, *From perturbative to constructive renormalization*, Princeton University Press, 1991.
- [Roe91] G. Roepsdorf, *Pfadintegrale in der Quantenphysik*, Vieweg, 1991.
- [Rue69] D. Ruelle, *Statistical mechanics, rigorous results*, W. A. Benjamin, Inc., 1969.
- [Rue82] D. Ruelle, *The obsessions of time*, Commun. Math. Phys. **85** (1982), 3–5.
- [Sal99] M. Salmhofer, *Renormalization, an introduction*, Springer Verlag, 1999.

- [SB81] P. S. Sahni and J. R. Banavar, *Monte-carlo renormalization for the  $d = 3$  Ising model on a face-centered cubic lattice*, Phys. Rev. A **85** (1981), 56.
- [Sch89] G. Scharf, *Finite quantum elektrodynamics*, Springer Verlag, 1989.
- [Sch96] N. Schmitz, *Vorlesungen über Wahrscheinlichkeitstheorie*, Teubner Studienbücher, 1996.
- [Sch98] B. Schroer, *QFT at the turn of the century: old principles with new concepts (an essay on local quantum physics)*, hep-th/9810080 (1998).
- [SCL92] D. R. Swanson, T. C. P Chui, and J. A. Lipa, *Propagation of second sound near  $t_\lambda$* , Phys. Rev. B **46** (1992), no. 14, 9043–9050.
- [SH78] R. M. Suter and C. Hohenemser, *Measurement of  $\nu$  for Fe*, Phys. Rev. Lett. **41** (1978), 705.
- [Sim74] B. Simon, *The  $P(\phi)_2$  euclidean (quantum) field theory*, Princeton University Press, 1974.
- [Sim79] B. Simon, *Functional integration and quantum physics*, Academic Press, 1979.
- [Sin82] Ya. G. Sinai, *Theory of phase transitions: Rigorous results*, Pergamon Press, 1982.
- [Sko74] A. V. Skorohod, *Integration in Hilbert space*, Springer Verlag, 1974.
- [SW64] R.F. Streater and A. Wightman, *PCT, Spin and Statistics, and All That*, New York: Benjamin, 1964.
- [Swe79a] R. H. Swendsen, *Comparison of two renormalization schemes for the  $d = 2$  Ising model*, Phys. Rev. B **20** (1979), 2080.
- [Swe79b] R. H. Swendsen, *The development of monte-carlo renormalization*, Phys. Rev. Lett. **42** (1979), 859.
- [Sym66] J. Symanzik, *Euclidean quantum field theory, I. Equations for a scalar model*, J. Math. Phys. **7** (1966), 510–525.
- [Sym69] J. Symanzik, *Euclidean quantum field theory*, Local Quantum Field Theory (Proc. Int. School of Physics 'E. Fermi', Varenna) (R. Jost, ed.), Academic Press, 1969.
- [VW92] C. Vohwinkel and P. Weisz, *Low-temperature expansion in the  $d = 4$  Ising model*, Nucl. Phys. B **374** (1992), 647.
- [Wit89] E. Witten, *Quantum field theory and the jones polynomial*, Commun. Math. Phys. **121** (1989), 351.

- [Wit98] P. Wittwer, *The raison d'être of anomalous dimension*, Script of Talk, Rutgers University (March 5, 1998), 1998.
- [WK74] K. G. Wilson and J. Kogut, *The renormalization group and the  $\epsilon$ -expansion*, Physics Letters C **2** (1974), 75–200.
- [WKS94] S. Wiegand, M. Kleemeier, J.-M. Schröder, and H. Weingartner, Int. J. Thermophys. **15** (1994), 1045.
- [Wor74] M. Wortis, *Linked cluster expansion*, Phase transition and critical phenomena (C. Domb and M.S. Green, eds.), vol. 3, Academic Press, 1974, pp. 113–180.
- [ZJ90] J. Zinn-Justin, *Quantum field theory and critical phenomena*, Oxford Science Publications, 1990.







# Lebenslauf

## *Persönliche Daten:*

Name: Johannes Göttker-Schnetmann  
geboren am 30.09.1969 in Münster  
Familienstand: ledig  
Eltern Jost Göttker-Schnetmann  
Christel Göttker-Schnetmann (geb. Dürschlag)

## *Schulbildung:*

1976-1980: Gertrudenschule, Münster  
1980-1989: Gymnasium Kinderhaus, Münster  
(heute Geschwister-Scholl-Gymnasium)  
22.05.1989 Abschluß mit der Allgemeinen Hochschulreife, Münster

## *Wehrdienst:*

01.06.1989-31.08.1990 3. und 4. Kompanie des Transportbataillon 170 in Rheine.

## *Studium:*

03.09.1990-23.02.1996 Studium der Physik an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster  
23.02.1996: Abschluß des Studiums mit dem Diplom in Physik. Titel der Arbeit: „Analytische und numerische Untersuchungen hierarchischer Renormierungsgruppenfixpunkte am Beispiel  $O(N)$ -invariante Modelle“

## *Tätigkeiten:*

01.09.1995-01.03.1996 studentische Hilfskraft am Institut für theoretische Physik der WWU Münster  
01.03.-31.08.1996 wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für theoretische Physik der WWU Münster  
01.09.1996-31.03.2000 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für theoretische Physik der WWU Münster  
01.04.-31.07.2000 wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für theoretische Physik der WWU Münster

## *Dissertation:*

März 1996 Beginn der Dissertation am Institut für theoretische Physik der WWU Münster bei Prof. Dr. G. Münster.

---

(Johannes Göttker-Schnetmann)



Last but not least möchte ich mich bedanken

- bei Prof. Dr. Gernot Münster, Dr. Andreas Pordt und Dr. Thomas Reiß für die Betreuung bei der Anfertigung dieser Arbeit.
- bei den Organisatoren des Seminars für mathematische Physik und konforme Feldtheorie Dr. Christian Wieczorkowski und Dr. Andreas Pordt und den Teilnehmern an diesem Seminar für viele interessante Diskussionen, wie auch bei den Mitgliedern des Institutes für theoretische Physik für anregende Vorträge und Diskussionen im Seminar für Quantenfeldtheorie oder auch außerhalb des Seminars.
- Persönlich danken möchte ich Anja und meiner Familie für ihre Unterstützung und Jost und Christian für die Diskussionen über Maße, Räume, Quantisierung und den Zustand der theoretischen Physik im allgemeinen, sowie für die Korrektur vieler Rechtschreib- und sonstiger -fehler. Ferner geht man Dank an alle, die mit mir während meiner Zeit am Institut für theoretische Physik I in Münster das Zimmer geteilt haben für ihre Geduld.
- Auch alle Teilnehmer des „Quantentees“ haben immer wieder zur Verbesserung meiner Arbeitseinstellung beigetragen. Und dann gab es da noch die Parkplatz-Seminare mit Tobias, z.T. bis spät in die Nacht...
- Besonders dankend zu erwähnen wären noch die Dart-Turniere mit Christian, Jens und Klaus. Mit Klaus gab es dann noch diverse Qu\*ke-Sitzungen... Als gebürtiger Müsli-Programmierer (Linux-Zugereister) hielten sich meine Chancen gegen ihn allerdings in engen Grenzen. Wer erinnert sich eigentlich noch an Netmaze?
- Natürlich haben auch viele andere Menschen zum Zustandekommen dieser Arbeit beigetragen, die ich hier nicht alle auflisten kann. So z.B. die Verrückten, die sich ohne Motor am Himmel herumtreiben, eine gewisse Computer-Firma und noch viele andere. Ihnen allen sei hiermit ebenfalls ein herzlicher Dank ausgesprochen!
- Nicht zuletzt geht mein Dank an Andreas und Juri, für die Diskussionen und E-Mail-Konversationen über Physik und die Welt, für die Zeit, in der wir zusammen Physik gelernt haben und für ihr Verständnis für meine Besessenheit „endlich die QFT zu verstehen“ – und für meine manchmal schrägen Ansichten zu diesem Thema.













