

Reihenanalysen für das 3-dimensionale Ising-Modell

als Diplomarbeit vorgelegt von
Elmar Siepmann

September 1993

Institut für Theoretische Physik I
Westfälische Wilhelms–Universität Münster

Nina Paus gewidmet

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	6
2 Notationen	8
2.1 ϕ^4 -Theorie	8
2.2 Ising-Modell	11
2.3 Kritische Größen	13
2.3.1 Definition und Eigenschaften	14
2.3.2 Kritisches Verhalten der untersuchten Größen	16
3 Methoden	18
3.1 Beschreibung	18
I Naive Padés	19
II Dlog Padés	20
III Dlog Padés mit Vorgabe des kritischen Punktes	20
IV Division durch die führende Singularität	20
V Doppelintegrationsmethode	21
3.2 Test der Methoden	23
3.2.1 Approximation von glatten Funktionen	23
3.2.2 Reproduktion von einfachen Polen	25
3.2.3 Einfluß konfluenter Singularitäten	25
3.2.4 Die Energie des Ising-Modells	26

4 Anwendung auf das 3-dimensionale Ising-Modell	28
4.1 Hoch- und Tieftemperaturreihen	28
4.2 Der kritische Punkt	28
4.2.1 Hochtemperaturphase	28
4.2.2 Tieftemperaturphase	30
4.3 Kritische Exponenten	36
4.3.1 Anwendung von Methode II	36
4.3.2 Anwendung von Methode III	39
4.4 Kritische Amplituden	42
4.4.1 Anwendung von Methode IV	42
4.4.2 Berücksichtigung konfluenter Beiträge	46
4.5 Amplitudenverhältnisse	48
4.5.1 Verhältnisse in einer Phase	48
4.5.2 Verhältnisse aus zwei Phasen	52
5 Zusammenfassung	60
Literaturverzeichnis	62
A Die Reihen	65
A.1 Hochtemperaturphase	65
A.2 Tieftemperaturphase	67

Tabellenverzeichnis

2.1	Bezeichnungen für die kritischen Größen der untersuchten Funktionen	16
3.1	Bestimmung von e	24
3.2	Bestimmung von π	25
3.3	Einfluß konfluenter Singularitäten	26
3.4	Energiefunktion	27
4.1	Kritischer Punkt in der Hochtemperaturphase	30
4.2	Unphysikalische Singularität in der Hochtemperaturphase	31
4.3	Kritischer Punkt in der Tieftemperaturphase	31
4.4	Unphysikalische Singularität in der Tieftemperaturphase	34
4.5	Kritische Exponenten in der Hochtemperaturphase	38
4.6	Kritische Exponenten in der Tieftemperaturphase	38
4.7	Kritische Exponenten in der unphysikalischen Singularität der Tief- temperaturphase	39
4.8	Padé-Tabelle für C_+ mit $\gamma = 1.24$	43
4.9	Hochtemperaturamplituden	44
4.10	Hochtemperaturamplituden mit Exponent γ	44
4.11	Hochtemperaturamplituden mit Exponent ν	44
4.12	Berechnung der feldtheoretischen Größen aus den statistischen	44
4.13	Tieftemperaturamplituden	45
4.14	Tieftemperaturamplituden von Größen mit Exponent γ	46

4.15	Tieftemperaturamplituden von Größen mit Exponent ν	46
4.16	Berechnung der feldtheoretischen Größen aus den statistischen	46
4.17	Konfluente Beiträge in C_+, C_-	47
4.18	Konfluente Beiträge in f_+, f_-	47
4.19	Konfluente Beiträge in g_R^+	47
4.20	u^* in der Hochtemperaturphase	48
4.21	Methode V, angewandt auf u_R	48
4.22	\tilde{u}^*	51
4.23	Methode III, angewandt auf $\frac{d\tilde{u}_R}{du}$	52
4.24	$u^{(4)*}$	53
4.25	$\frac{C_+}{C_-}$	54
4.26	$\frac{f_+}{f_-}$	54
4.27	Ergebnisse für $\frac{C_+}{C_-}$ durch Reihendivision	55
4.28	Ergebnisse für $\frac{f_+}{f_-}$ durch Reihendivision	55

Abbildungsverzeichnis

3.1	Schematische Darstellung von Methode V	22
3.2	Diagonalapproximanten an die Energiefunktion	27
4.1	Auswertung der Dlog Padés von χ_2^+ zur Bestimmung von K_c	29
4.2	Ausschnitt aus Abbildung 4.1	29
4.3	Polstellenverteilung von χ_3^-	32
4.4	Polstellenverteilung von m_R^-	32
4.5	Polstellenverteilung von \tilde{g}_R	33
4.6	Polstellenverteilung von $g_R^{(4)}$	33
4.7	Übersicht über den kritischen Punkt	35
4.8	Ausschnitt aus 4.7	36
4.9	Residuen und Polstellen von χ_2^+	37
4.10	Ausschnitt aus Abbildung 4.9	37
4.11	Einschränkung des Parameterraums der Exponenten durch die bestimmten Exponenten	40
4.12	Zusammenstellung der Ergebnisse für u^*	50
4.13	Komplexe Pole der Kopplung $g_R^{(4)}$	53
4.14	Zusammenstellung der Ergebnisse für $\frac{c_+}{c_-}$	57
4.15	Zusammenstellung der Ergebnisse für $\frac{f_+}{f_-}$	59

Kapitel 1

Einleitung

Das Ising-Modell als einfaches mikroskopisches Modell für einen Ferromagneten wird schon lange untersucht [HUA87],[BRU67]. Exakte Lösungen existieren in einer Dimensionen von Ising [ISI25] und in zwei Dimensionen von Onsager [ONS44]. In höheren Dimensionen sind keine exakten Lösungen bekannt. In zwei Dimensionen trat, erstmalig für ein exakt lösbares System, eine kritische Temperatur (Curiepunkt) auf. Hierbei tritt bei Unterschreiten der kritischen Temperatur eine spontane Magnetisierung auf. Hierdurch wird die Symmetrie des Systems unter der Transformation der Spineinkehr gebrochen. Man spricht daher von der symmetrischen ($T > T_c$) und der gebrochenen ($T < T_c$) Phase. Im kritischen Punkt bleibt die freie Energie sowie ihre ersten Ableitungen endlich, während die zweiten Ableitungen divergieren. Man bezeichnet dies daher als Phasenübergang zweiter Ordnung [FIS67]. Weiterhin stellte sich heraus, daß das Verhalten des Systems bei Annäherung an diese Temperatur Gemeinsamkeiten sowohl mit realen Systemen als auch mit theoretisch interessanten Systemen aufweist. Hier sei nur die im Standardmodell auftretende ϕ^4 -Theorie erwähnt. Man kann daher im Ising-Modell gewonnene Informationen auf Modelle, die selbst schwerer theoretisch zu behandeln wären, übertragen. Dieses ist möglich, da auf das Ising-Modell in höheren Dimensionen verschiedene Näherungsverfahren anwendbar sind [YEO92]. Als wohl wichtigste seien Monte-Carlo-Rechnungen, die Renormierungsgruppe und die hier verwendeten Reihenentwicklungen genannt.

Die Analogie zwischen den verschiedenen Modellen wird heute mit Hilfe der Renormierungsgruppe [WIL83] verstanden. Durch sie konnte gezeigt werden, daß die Menge der Modelle in sogenannte Universalitätsklassen zerfällt. Die Zuordnung zu einer dieser Klassen hängt nicht von den mikroskopischen Details des Modells, sondern nur von der Dimension, der Anzahl der Spin-Freiheitsgrade sowie der Symmetrie des Systems ab. Innerhalb dieser Klassen haben einige der das kritische Verhalten beschreibenden kritischen Größen bei allen Modellen die gleichen Werte. Hierzu zählen sowohl die kritischen Exponenten als auch einige Amplitudenverhältnisse. Weiterhin liefert die Renormierungsgruppe jedoch auch Gleichungen (Skalenrelationen), die zwischen diesen universellen Größen gelten müssen.

Innerhalb der Modelle benötigt man für weiterführende Betrachtungen häufig die numerischen Werte dieser Größen. Hieraus ergibt sich die Notwendigkeit, diese zu bestimmen. Da dieses mit unterschiedlichen Methoden geschehen kann, kann man verschiedene Zugänge miteinander vergleichen. In dieser Arbeit sollen zu ihrer Bestimmung Reihenanalysen verwendet werden. Der Schwerpunkt wird hierbei auf der Bestimmung von Amplitudenverhältnissen liegen. Dieses ist kein neuer Zugang. So wurde die Bestimmung von Amplitudenverhältnissen aus Hoch- und Tieftemperaturreihen in [TF75] und [LF89] bereits durchgeführt. Da jedoch in letzter Zeit längere Tieftemperaturreihen berechnet wurden [VOH93], erscheint es sinnvoll, dieses Thema noch einmal aufzugreifen. Hierbei sollen verschiedene Methoden angewendet und miteinander verglichen werden.

Die weitere Arbeit gliedert sich wie folgt:

In Kapitel 2 wird das Ising-Modell definiert, und es werden die notwendigen Bezeichnungen eingeführt. In Kapitel 3 werden die verwendeten Methoden beschrieben und an einigen Beispielen getestet. Hieran schließt sich in Kapitel 4 die Bestimmung der kritischen Größen im Ising-Modell an. Im Anhang befindet sich eine Zusammenstellung der verwendeten Reihen. Die berechneten Padé-Tabellen konnten aufgrund ihres Umfangs nicht mit aufgenommen werden.

Kapitel 2

Notationen

2.1 ϕ^4 -Theorie

Der folgende Abschnitt enthält eine kurze Einführung in die ϕ^4 -Theorie [MM93]. Die ϕ^4 -Theorie beschreibt unter anderem das Higgs-Feld im Standardmodell der elektroschwachen Wechselwirkung. Sie wird in D-Dimensionen durch folgende euklidische Wirkung beschrieben:

$$S[\phi_0] = \int d^D x \left\{ \frac{1}{2}(\partial_\mu \phi_0)^2 + \frac{m^2}{2}\phi_0(x)^2 + \frac{g}{4!}\phi_0(x)^4 \right\} \quad (2.1)$$

Um den euklidischen Funktionalintegralformalismus wohldefiniert zu machen, führt man eine Gitterregularisierung durch. Hierbei kann die Gitterkonstante durch Umnormierung der Längenskala ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf 1 gesetzt werden. Außerdem führt man üblicherweise folgende Umparametrisierungen durch:

$$\phi_0(x) = (2\kappa)^{\frac{1}{2}}\phi(x) \quad (2.2)$$

$$m^2 = \frac{1 - 2\lambda}{\kappa} - 2D \quad (2.3)$$

$$g = \frac{6\lambda}{\kappa^2} \quad (2.4)$$

Nun ergibt sich für die Wirkung:

$$S = \sum_{x \in G} \left\{ -2\kappa \left(\sum_{\mu=1}^D \phi(x)\phi(x + \hat{\mu}) \right) + \phi(x)^2 + \lambda [\phi(x)^2 - 1]^2 - \lambda \right\} \quad (2.5)$$

Hierbei bezeichnet $\hat{\mu}$ für $\mu = 1 \dots D$ den μ -ten Einheitsvektor und G die Menge aller Gitterpunkte. Die Greensfunktionen sind durch

$$G(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle = \frac{\int \prod_x d\phi(x) \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{-S[\phi]}}{\int \prod_x d\phi(x) e^{-S[\phi]}} \quad (2.6)$$

definiert. Sie werden durch das Funktional

$$Z[H'] = \frac{1}{Z} \int \prod_x d\phi(x) e^{-S[\phi] + \sum_x H'(x)\phi(x)} \quad (2.7)$$

mit

$$Z = \int \prod_x d\phi(x) e^{-S[\phi]} \quad (2.8)$$

erzeugt. Über das Funktional

$$W[H'] = \log Z[H'] \quad (2.9)$$

werden die verbundenen Greensfunktionen definiert:

$$G_c(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle_c = \frac{\delta^n}{\delta H'(x_1) \cdots \delta H'(x_n)} W[H'] \quad (2.10)$$

Der Felderwartungswert

$$M(x) = \frac{1}{Z} \int \prod'_x d\phi(x') \phi(x) e^{-S[\phi] + \sum'_x H'(x')\phi(x')} \quad (2.11)$$

lässt sich durch

$$M(x) = \frac{\delta W}{\delta H'(x)} \quad (2.12)$$

berechnen. Um das erzeugende Funktional der Vertexfunktionen

$$\Gamma[M] = \sum_n \frac{1}{n!} \sum_{x_1 \dots x_n} M(x_1) \cdots M(x_n) \Gamma^{(n)}(x_1, \dots, x_n) \quad (2.13)$$

zu erhalten, führt man die Legendretransformation

$$\Gamma[M] = W[H'] - \sum_x H'(x) M(x) \Big|_{H' = H'(M)} \quad (2.14)$$

durch. Für die weiteren Betrachtungen benötigt man die Fouriertransformierten der Greens-Funktionen:

$$\tilde{G}(p_1, \dots, p_n) = \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} e^{i(p_1 x_1 + \dots + p_{n-1} x_{n-1})} G(x_1, \dots, x_{n-1}, 0) \quad (2.15)$$

Hierbei muß $p_n = -(p_1 + \dots + p_{n-1})$ sein. Hierdurch wird insbesondere der Propagator

$$\tilde{G}(p) = \tilde{G}_c(p, -p) \quad (2.16)$$

definiert.

Da in der so definierten Theorie die physikalischen Größen im Kontinuumslimes divergieren, muß diese renormiert werden. Hierzu werden in der Störungstheorie bei jedem Entwicklungsschritt Gegensterme so in die Lagragedichte eingeführt, daß die Greensfunktionen endlich werden. Um dieses eindeutig durchführen zu können, werden folgende Renormierungsbedingungen gestellt.

- Das Verhalten des Propagators für kleine Impulse wird durch die renormierte Masse m_R und die Wellenfunktionsrenormierungskonstante Z_R bestimmt.

$$\tilde{G}(p)^{-1} = \frac{2\kappa}{Z_R} \left\{ m_R^2 + p^2 + \mathcal{O}(p^4) \right\} \quad (2.17)$$

Hieraus folgt:

$$\tilde{G}(0) = \frac{Z_R}{2\kappa m_R^2} \quad (2.18)$$

$$-\frac{\partial}{\partial p_{nu}} \frac{\partial}{\partial p_{nu}} \tilde{G}(p) \Big|_{p=0} = 2D \frac{Z_R}{2\kappa m_R^4} \quad (2.19)$$

- Die 4-Punkt-Vertexfunktion bei Impulsen 0 wird durch die renormierte Kopplung $g_R^{(4)}$ festgelegt:

$$g_R^{(4)} = - \left(\frac{Z_R}{2\kappa} \right)^{4/2} \Gamma^{(4)}(0, 0, 0, 0) \quad (2.20)$$

Hierfür lässt sich folgende Beziehung nachrechnen:

$$g_R^{(4)} = - \frac{(2D)^2}{-\frac{\partial}{\partial p_{nu}} \frac{\partial}{\partial p_{nu}} \tilde{G}(p) \Big|_{p=0}} \left\{ \tilde{G}_c(0, 0, 0, 0) - 3 \frac{\tilde{G}_c(0, 0, 0)^2}{\tilde{G}_c(0, 0)} \right\} \quad (2.21)$$

- In der gebrochenen Phase kann man mit dem renormierten Erwartungswert des Feldes

$$v_R = \left(\frac{Z_R}{2\kappa} \right)^{-\frac{1}{2}} M \quad (2.22)$$

auch folgende Kopplung verwenden:

$$\tilde{g}_R = 3 \frac{m_R^2}{v_R^2} \quad (2.23)$$

Da in 3 Dimensionen die renormierten Kopplungen die Dimension einer Masse tragen, definiert man hier dimensionslose Kopplungen, indem man durch die renormierte Masse dividiert:

$$u_R^{(4)} = \frac{g_R^{(4)}}{m_R} \quad (2.24)$$

$$\tilde{u}_R = \frac{\tilde{g}_R}{m_R} \quad (2.25)$$

2.2 Ising-Modell

Ausgehend von der im vorherigen Abschnitt beschriebenen ϕ^4 -Theorie, soll nun das Ising-Modell definiert werden. In der ϕ^4 -Theorie sind zwei freie Parameter (κ, λ) vorhanden. Läßt man nun den die Kopplung beschreibenden Parameter λ gegen unendlich gehen, so beobachtet man folgendes: Der Term $-\lambda$ läßt sich als Faktor $e^{-V\lambda}$ ($V =$ Volumen=Anzahl der Gitterpunkte) aus dem Funktionalintegral herausziehen. Er kürzt sich daher im erzeugenden Funktional weg und hat keine physikalische Bedeutung. Anders ist dies mit dem Term $\lambda[\phi(x)^2 - 1]^2$. Für $\phi(x) \notin \{-1, 1\}$ wird die Wirkung groß, wenn λ groß wird. Weil eine große Wirkung kleine Beiträge (e^{-S}) im Funktionalintegral liefert, tragen im Grenzfall $\lambda = \infty$ nur Feldkonfigurationen bei, in der das Feld nur die Werte $+1$ oder -1 annimmt. Man kann daher die Funktion ϕ durch eine Abbildung $s : G \rightarrow \{-1, 1\}$ ersetzen und die Integration über alle Feldkonfigurationen auf eine Summe über die Menge aller so gearteten Abbildungen (S) einschränken. Das erzeugende Funktional nimmt in diesem Fall folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} Z[H] &= \frac{\sum_{s \in S} e^{2\kappa \sum_{x \in G} \left(\sum_{\mu=1}^D s(x)s(x+\hat{\mu}) \right) - 1 + H(x)s(x)}}{\sum_{s \in S} e^{2\kappa \sum_{x \in G} \left(\sum_{\mu=1}^D s(x)s(x+\hat{\mu}) \right) - 1}} \\ &= \frac{\sum_{s \in S} e^{2\kappa \sum_{x \in G} \left(\sum_{\mu=1}^D s(x)s(x+\hat{\mu}) \right) + H(x)s(x)}}{\sum_{s \in S} e^{2\kappa \sum_{x \in G} \left(\sum_{\mu=1}^D s(x)s(x+\hat{\mu}) \right)}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Betrachtet man den Zähler dieses Funktionals, so läßt sich dieser auch als Zustandssumme eines statistischen Systems mit der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = -J \sum_{x \in G} \left(\sum_{\mu=1}^D s(x)s(x+\hat{\mu}) \right) - H(x)s(x) \quad (2.27)$$

auffassen. Hierzu wurden die Bezeichnungen

$$\beta J = 2\kappa \quad (2.28)$$

$$\beta H = 2\kappa H' \quad (2.29)$$

mit

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (\text{T Temperatur}) \quad (2.30)$$

verwendet. Dieses ist gerade die Hamiltonfunktion des Spin- $\frac{1}{2}$ -Ising-Modells. In diesem magnetischen Modell befindet sich auf jedem Gitterplatz ein Elementarmagnet (Spin), für den nur zwei Einstellungen erlaubt sind. Es wechselwirken nur nächste Nachbarn derart miteinander, daß bei gleicher Spineinstellung ein Energiebeitrag $-J$ und bei ungleicher Spineinstellung ein Beitrag J auftritt. Zu dieser Selbstwechselwirkung kommt noch eine Wechselwirkung an eine Raumkomponente eines äußeren magnetischen Feldes H . Der Energiebeitrag hiervon ist $\pm H$.

Mit $K := \beta J$ und $h := \beta H$ erhält man nun für die Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s \in S} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \sum_{s \in S} \exp \left(\sum_{x \in G} \left(K \sum_{\mu=1}^D s(x) x(x + \hat{\mu}) \right) + h(x) s(x) \right) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Als thermodynamisches Potential wird die freie Energie

$$F = -\log Z \quad (2.32)$$

verwendet. Sie ist gleich dem negativen erzeugenden Funktional der verbundenen Greens-Funktionen in der feldtheoretischen Notation. Bei konstantem äußeren Feld ergibt sich für die Magnetisierung:

$$M = -\frac{1}{V} \frac{dF}{dh} \Big|_{h=0} \quad (2.33)$$

$$= \langle s(0) \rangle \quad (2.34)$$

Die Suszeptibilitäten erhält man durch:

$$\chi_n = -\frac{1}{V} \frac{d^n F}{(dh)^n} \Big|_{h=0} \quad (2.35)$$

$$= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1} \in G} \langle s(x_1) \cdots s(x_{n-1}) \rangle_c \quad (2.36)$$

Weiterhin definiert man noch das zweite Moment:

$$\mu_2 := \sum_x x^2 \langle s(x) s(0) \rangle_c \quad (2.37)$$

Mit Hilfe dieser Größen kann man die Korrelationslänge definieren, die angibt, über welche Entfernung Korrelationen zu beobachten sind:

$$\begin{aligned} \xi^2 &:= \frac{1}{2D} \frac{\sum_x x^2 \langle s(x) s(0) \rangle_c}{\sum_x \langle s(x) s(0) \rangle_c} \\ &= \frac{1}{2D} \frac{\mu_2}{\chi_2} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Vergleicht man mit dem vorherigen Abschnitt, so ergeben sich die Beziehungen:

$$\chi_n = \tilde{G}_c^n(0, \dots, 0) \quad (2.39)$$

$$\mu_2 = -\frac{\partial}{\partial p_\nu} \frac{\partial}{\partial p_\nu} \tilde{G}(p) \Big|_{p=0} \quad (2.40)$$

Hierdurch lassen sich nun die feldtheoretischen Größen durch die statistischen ausdrücken. Aus den entsprechenden Gleichungen (2.18, 2.19, 2.21, 2.22, 2.23) des vorherigen Abschnitts folgt:

$$m_R^2 = \frac{2D\chi_2}{\mu_2} = \frac{1}{\xi} \quad (2.41)$$

$$Z_R = 2\kappa \frac{2D\chi_2^2}{\mu_2} \quad (2.42)$$

$$g_R^{(4)} = -\frac{(2D)^2}{\mu_2^2} \left\{ \chi_4 - 3\frac{\chi_3^2}{\chi_2} \right\} \quad (2.43)$$

$$\tilde{g}_R = 12D^2 \frac{\chi_2^3}{\mu_2^2 M^2} \quad (2.44)$$

Anstelle der Größe Z_R wird im Folgenden

$$\tilde{Z}_R = \frac{Z_R}{2\kappa} = 2D \frac{\chi_2^2}{\mu_2} \quad (2.45)$$

verwendet.

2.3 Kritische Größen

Wie schon in der Einleitung erwähnt, besitzt das dreidimensionale Ising-Modell eine kritische Temperatur T_c . Dieses bedeutet, daß die thermodynamischen Größen hier nicht analytisch sind. Bei Annäherung an diese Temperatur erwartet man in erster Ordnung ein potenzartiges Verhalten bezüglich der Variablen $|1 - \frac{T}{T_c}|$. Dieses drückt man durch die Schreibweise

$$f(T) \sim A \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^\alpha \quad (2.46)$$

aus. Dieses bedeutet jedoch nicht, daß hierdurch die funktionale Gestalt von f in der Nähe des kritischen Punktes vollständig wiedergegeben wird. Diese kann wesentlich komplizierter sein. Eine Erweiterung sind potenzartige konfluente Singularitäten der Form:

$$f(x) \sim A \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^\alpha \left(1 + B \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^\epsilon \right) \text{ mit } \epsilon > 0 \quad (2.47)$$

Dieses ist jedoch nur eine mögliche Erweiterung, es sind z.B. auch logarithmische Korrekturen oder noch kompliziertere Formen möglich. Im Folgenden werden nun der kritische Exponent (α) und die kritische Amplitude (A) genauer definiert und einige Eigenschaften aufgelistet.

2.3.1 Definition und Eigenschaften

Im Folgenden sei $x_c \in \mathbb{R}$ und U punktierte Umgebung von x_c .
Weiter sei $f : U \rightarrow \mathbb{R} \setminus \{0\}$ stetig.

Definition (Kritische Exponenten)

Falls die folgenden Grenzwerte existieren, sind durch sie die kritischen Exponenten gegeben:

$$\alpha_{x_c}^+(f) := \lim_{x \searrow x_c} \frac{\ln |f(x)|}{\ln |x - x_c|} \quad (2.48)$$

$$\alpha_{x_c}^-(f) := \lim_{x \nearrow x_c} \frac{\ln |f(x)|}{\ln |x - x_c|} \quad (2.49)$$

Eigenschaften:

1.

$$\alpha_{x_c}^\pm(fg) = \alpha_{x_c}^\pm(f) + \alpha_{x_c}^\pm(g) \quad (2.50)$$

2.

$$\alpha_{x_c}^\pm(f^\beta) = \beta \alpha_{x_c}^\pm(f) \quad (2.51)$$

Diese beiden Eigenschaften folgen direkt aus der Definition.

3. Der so definierte Exponent ist unabhängig von der gewählten Parametrisierung:

$\forall y : U \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar mit $x_c \in U, y'(x_c) \neq 0, f : y(U) \setminus \{y(x_c)\} \rightarrow \mathbb{R} \setminus \{0\}$ gilt:

$$\alpha_{y(x_c)}^\pm(f) = \begin{cases} \alpha_{x_c}^\pm(f \circ y) & \text{falls } y'(x_c) > 0 \\ \alpha_{x_c}^\mp(f \circ y) & \text{falls } y'(x_c) < 0 \end{cases} \quad (2.52)$$

Beweis für $\alpha_{y(x_c)}^+(f)$ mit $y'(x_c) > 0$:

$$\begin{aligned} \alpha_{x_c}^+(f \circ y) &= \lim_{x \searrow x_c} \frac{\ln |f \circ y(x)|}{\ln |x - x_c|} \\ &= \lim_{x \searrow x_c} \frac{\ln |f \circ y(x)|}{\ln |y(x) - y(x_c)|} \frac{\ln |y(x) - y(x_c)|}{\ln |x - x_c|} \\ &= \alpha_{y(x_c)}^+(f) \lim_{x \searrow x_c} \frac{\ln |y(x) - y(x_c)|}{\ln |x - x_c|} \quad y \text{ stetig} \\ &= \alpha_{y(x_c)}^+(f) \lim_{x \searrow x_c} \frac{x - x_c}{y(x) - y(x_c)} y'(x) \quad \text{L'Hospital} \\ &= \alpha_{y(x_c)}^+(f) \end{aligned}$$

Definition (Kritische Amplitude)

Bei existierenden Exponenten lassen sich durch folgende Grenzwerte, falls existierend, die Amplituden definieren:

$$A_{x_c}^+(f) := \lim_{x \searrow x_c} \left| 1 - \frac{x}{x_c} \right|^{-\alpha_{x_c}^+(f)} f(x) \quad (2.53)$$

$$A_{x_c}^-(f) := \lim_{x \nearrow x_c} \left| 1 - \frac{x}{x_c} \right|^{-\alpha_{x_c}^-(f)} f(x) \quad (2.54)$$

Mit diesen Definitionen verwendet man nun die Schreibweise:

$$f(x) \sim A_{x_c}^\pm(f) \left| 1 - \frac{x}{x_c} \right|^{\alpha_{x_c}^\pm(f)} \quad (2.55)$$

Eigenschaften:

1.

$$A^\pm(f g) = A^\pm(f) A^\pm(g) \quad (2.56)$$

2.

$$\alpha_{x_c}^\pm(f) = \alpha_{x_c}^\pm(g) \Rightarrow A^\pm(f + g) = A^\pm(f) + A^\pm(g) \quad (2.57)$$

3.

$$A^\pm(f^\beta) = (A^\pm(f))^\beta \quad (2.58)$$

4. Verhalten bei Umparametrisierung:

$\forall y : U \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar mit $x_c \in U, y'(x_c) \neq 0$,
 $f : y(U) \setminus \{y(x_c)\} \rightarrow \mathbb{R} \setminus \{0\}$ gilt:

$$A_{y(x_c)}^\pm(f) = \begin{cases} \left| \frac{x_c}{y(x_c)} y'(x_c) \right|^{-\alpha} A_{x_c}^\pm(f \circ y) & \text{falls } y'(x_c) > 0 \\ \left| \frac{x_c}{y(x_c)} y'(x_c) \right|^{-\alpha} A_{x_c}^\mp(f \circ y) & \text{falls } y'(x_c) < 0 \end{cases} \quad (2.59)$$

Beweis für $A_{y(x_c)}^+(f)$ mit $y'(x_c) > 0$:

$$\begin{aligned} A_{y(x_c)}^+(f) &= \lim_{y \searrow y(x_c)} \left| 1 - \frac{y}{y(x_c)} \right|^{-\alpha_{y(x_c)}^+(f)} f(y) \\ &= \lim_{x \searrow x_c} \left| \frac{x_c}{y(x_c)} \frac{y(x_c) - y(x)}{x_c - x} \left(1 - \frac{x}{x_c} \right) \right|^{-\alpha_{x_c}^+(f \circ y)} f \circ y(x) \\ &= \left| \frac{x_c}{y(x_c)} y'(x_c) \right|^{-\alpha_{x_c}^+(f \circ y)} A_{x_c}^+(f \circ y) \end{aligned}$$

Größe	Exponent	Hochtemperaturamplitude	Tieftemperaturamplitude
χ_2	$-\gamma$	C_+	C_-
χ_3	$-\gamma - \Delta$	0	$A_-(\chi_3)$
χ_4	$-\gamma - 2\Delta$	$A_+(\chi_4)$	$A_-(\chi_4)$
μ_2	$-\gamma - 2\nu$	$A_+(\mu_2)$	$A_-(\mu_2)$
ξ	$-\nu$	f_+	f_-
M	β	0	B
m_R	ν	$1/f_+$	$1/f_-$
Z_R	$-\gamma + 2\nu$	$A_+(Z_R)$	$A_-(Z_R)$
$g_R^{(4)}$	ν	$A_+(g_R^{(4)})$	$A_-(g_R^{(4)})$
\tilde{g}_R	ν	$A_+(\tilde{g}_R)$	$A_-(\tilde{g}_R)$
$u_R^{(4)}$	0	u^*	$u^{(4)*}$
\tilde{u}_R	0	0	\tilde{u}^*

Tabelle 2.1: Bezeichnungen für die kritischen Größen der untersuchten Funktionen

2.3.2 Kritisches Verhalten der untersuchten Größen

Notationen

Die im Folgenden verwendeten Bezeichnungen für die kritischen Größen sind in Tabelle 2.1 aufgelistet. Einige der Größen verschwinden in der symmetrischen Phase. Dort ist daher als Amplitude 0 angegeben.

Skalengesetze

Ein entscheidendes Merkmal des kritischen Punktes ist die Divergenz der Korrelationslänge. Da sie die physikalisch relevante Längenskala definiert, gelangt man zur Annahme, daß im kritischen Punkt die Physik des Systems invariant unter Skalentransformationen ist. Diese Skalenhypothese führt zu einer Homogenitätsforderung an die freie Energie. Hieraus lassen sich die Skalenrelationen ableiten [HUA87]. Das sind Gleichungen zwischen kritischen Exponenten, die aus thermodynamischen Überlegungen nur als Ungleichungen zu begründen waren. Diese Relationen sind sowohl durch experimentelle Daten als auch durch Modellrechnungen in verschiedenen Systemen mit Erfolg nachgeprüft worden.

Erst durch Wilson konnten mit Hilfe der von ihm entwickelten Renormierungsgruppe die Skalenrelationen begründet werden.

Die Skalenrelationen sagen aus, daß die kritischen Exponenten in beiden Phasen die gleichen Werte annehmen. Außerdem gelten folgende Beziehungen:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{Essam,Fisher}) \quad (2.60)$$

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (\text{Kadanoff}) \quad (2.61)$$

$$\gamma = \nu(2 - \alpha) \quad (\text{Fisher}) \quad (2.62)$$

$$\mu = (d - 1)\nu \quad (\text{Widom}) \quad (2.63)$$

$$2\Delta = d\nu + \gamma \quad (2.64)$$

Hierbei ist α der kritische Exponent der spezifischen Wärme. Diese wird hier jedoch nicht betrachtet. Mit Hilfe dieser Beziehungen ergibt sich für die dimensionslosen Kopplungen als kritischer Exponent Null. Im kritischen Punkt nehmen diese Kopplungen endliche Werte an. Mit Hilfe der Renormierungsgruppe kann gezeigt werden, dass diese Werte universell sind. Aufgrund der Gleichheit der Exponenten auf beiden Seiten des kritischen Punktes macht es Sinn, das Amplitudenverhältnis $\frac{A_+}{A_-}$ für verschiedene Größen zu betrachten. Auch dieses sind universelle Größen [SFW72],[HAHS76]. Hier werden die Verhältnisse $\frac{c_+}{c_-}$ der Suszeptibilität (χ_2) und $\frac{f_+}{f_-}$ der Korrelationslänge bzw. der renormierten Masse betrachtet.

Kapitel 3

Methoden

3.1 Beschreibung

Für die in Kapitel 2 definierten Größen lassen sich durch kombinatorische Verfahren exakte Taylorreihen bestimmen [DOM74]. Hierbei unterscheidet man zwischen Hoch- und Tief temperaturreihen.

Diese sind für das hier betrachtete dreidimensionale Ising-Modell auf dem einfach kubischen Gitter im Anhang A aufgelistet. Bei den Hochtemperaturreihen wird die Variable

$$t = \tanh K = \tanh\left(\frac{J}{k_B T}\right)$$

verwendet. Mit diesen Reihen wird somit das Verhalten für hohe Temperaturen beschrieben. Man erwartet im hier betrachteten Modell, daß die physikalische Singularität (der kritische Punkt), diejenige ist die am nächsten am Ursprung liegt und somit den Konvergenzradius bestimmt.

Die Tief temperaturreihen sind eine Entwicklung in der Variablen:

$$u = e^{-4K} = e^{\frac{-4J}{k_B T}}$$

Mit ihnen läßt sich das Verhalten für kleine Temperaturen beschreiben. Bei diesen Reihen ergibt sich das Problem einer unphysikalischen Singularität: Die den Konvergenzradius begrenzende Singularität ist nicht mehr die physikalische, sondern liegt auf der negativen reellen Achse.

Im Folgenden sind aus diesen Reihen Aussagen über die schon definierten kritischen Größen zu machen. Das sind im Falle der Hochtemperaturreihen Aussagen über die betrachteten Funktionen am Rande des Konvergenzbereichs, bei den Tief temperaturreihen sogar deutlich außerhalb des Konvergenzbereichs. Hieraus folgt, daß die Auswertung der Reihe selbst nicht möglich ist. Im Hochtemperaturbereich

sind allerdings noch verschiedene direkte Methoden anwendbar, die sich auf das asymptotische Verhalten der Koeffizienten beziehen. Hierbei wird zum Beispiel das Verhältnis aufeinanderfolgender Koeffizienten betrachtet (ratio-method).

In der Tieftemperaturphase muß man die betrachtete Funktion über ihren Konvergenzradius hinaus fortsetzen. Hierzu kann man die Padé-Methode oder ihre Verallgemeinerung, die Differential-Approximanten-Methode, verwenden. Hier wird im Folgenden nur die Padé Methode verwendet. Eine Übersicht über zur Verfügung stehende Methoden zur Reihenanalysen wird in den Artikeln [GG74] und [GUT89] gegeben. Bei den folgenden Methoden wird von einer Reihe

$$f(x) = x^\delta \left(f_0 + f_1 x + \dots + f_N x^N \right)$$

ausgegangen.

I Naive Padés

Um die Fortsetzung außerhalb des Konvergenzbereiches zu ermöglichen, benötigt man zur Approximation eine Funktionsklasse, die selber Singularitäten aufweist. Das einfachste Beispiel einer solchen Klasse sind gebrochen rationale Funktionen. Man sucht daher eine gebrochen rationale Funktion, die die Informationen, die durch die Reihe gegeben sind, enthalten. Als $[n,m]$ Padé-Approximanten [PAD92] bezeichnet man daher eine gebrochen rationale Funktion mit Zählergrad n und Nennergrad m , so daß die ersten $n+m$ Ableitungen in 0 mit denjenigen der gegebenen Reihe übereinstimmen:

$$f_{[n,m]}(x) = \frac{P(x)}{Q(x)}$$

mit

$$P(x) = p_0 + p_1 x + \dots + p_n x^n$$

und

$$Q(x) = q_0 + q_1 x + \dots + q_m x^m$$

Die Forderung nach gleicher Taylorentwicklung ist äquivalent zur Gleichung:

$$f(x)Q(x) = P(x) + \mathcal{O}(x^{n+m+1})$$

Dieses ergibt ein lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten. Die Bestimmung eines solchen Approximanten geschieht entweder durch lösen dieses Gleichungssystems oder rekursiv.

Falls $\alpha \notin \mathbb{N} \cup \{0\}$, teilt man die zu untersuchende Reihe durch x^δ , bildet von der so erhaltenen Reihe den Padé-Approximanten und multipliziert diesen wieder mit dem Faktor x^δ . Die folgenden Methoden basieren alle auf Padé-Approximation, wobei jedoch zunächst Manipulationen an der gegebenen Reihe vorgenommen werden.

II Dlog Padés

Im Bereich der kritischen Phänomene wurden Padé-Approximanten zuerst von Baker [BAK61] verwendet. Dieses und das folgende Verfahren diente ihm dazu, den kritischen Punkt und kritische Exponenten zu bestimmen.

Man erwartet für die zu untersuchenden Größen ein Verhalten $f(x) \sim (1 - \frac{x}{x_c})^\alpha$. Um dieses zu untersuchen, bildet man die logarithmische Ableitung. Hierzu teilt man die Reihe vorher durch x^δ , da sich hierdurch das oben angegebene kritische Verhalten nicht verändert:

$$l(x) := \frac{d}{dt} \log \left(x^{-\delta} f(x) \right)$$

Für diese Reihe folgt nun:

$$l(x) \sim \frac{\alpha}{x - x_c}$$

Von dieser Reihe bildet man nun Padé-Approximanten. Betrachtet man die Polstruktur, so werden die Polstellen gegen die kritische Temperatur und die zugehörigen Residuen gegen den kritischen Exponenten konvergieren.

III Dlog Padés mit Vorgabe des kritischen Punktes

Ist der kritische Punkt mit genügender Genauigkeit bekannt, so multipliziert man die logarithmische Ableitung noch mit dem Faktor $(x - x_c)$ und erhält reguläres Verhalten:

$$m(x) := (x - x_c) \frac{d}{dt} \log \left(x^{-\delta} f(x) \right) \sim \alpha$$

Die kritischen Exponenten ergeben sich nun direkt als Funktionswerte im kritischen Punkt und können durch Auswertung der von dieser Reihe gebildeten Padés bestimmt werden.

IV Division durch die führende Singularität

Ist sowohl der kritische Punkt als auch der kritische Exponent (α) bekannt, so kann man die gegebene Reihe durch $\left(1 - \frac{x}{x_c}\right)^\alpha$ dividieren [BAK75]. Entwickelt man diesen Ausdruck, so erhält man die Taylorreihe $D(x)$ einer Funktion, die im kritischen Punkt die kritische Amplitude als Funktionswert annimmt:

$$D(x) = f(x) \left(1 - \frac{x}{x_c}\right)^{-\alpha}$$

Diese lässt sich somit wiederum durch Auswertung von Padés im kritischen Punkt bestimmen. Hierbei muß eventuell zunächst die so erhaltene Reihe durch x^δ geteilt und der dann erhaltene Approximant wieder mit diesem Faktor multipliziert werden.

V Doppelintegrationsmethode

Die folgende Methode dient dazu, Approximanten für solche Größen zu bestimmen, die im kritischen Punkt einen endlichen Wert annehmen, jedoch eine konfluente Singularität besitzen. Sie wurde bereits in [BM89] verwendet. Es wird also ein Verhalten

$$\tilde{f}(y) \sim A + B \left| 1 - \frac{y}{y_c} \right|^{\omega} \quad (\omega > 0)$$

angenommen. Außerdem wird vorausgesetzt, daß der kritische Punkt mit ausreichen-
der Genauigkeit bekannt ist, so daß man durch Substitution $x := \frac{y}{y_c}$ ein Verhalten

$$f(x) \sim A + B |1 - x|^{\omega} \quad (\omega > 0)$$

erhält. Da Padé-Approximanten nur meromorphes Verhalten gut wiedergeben können, werden zunächst einige Umformungen an der Reihe vorgenommen. Um die Über-
sicht über diese Schritte zu erleichtern, sind sie in Abb. 3.1 schematisch aufgeführt.

1. Differentiation, um die nicht führende Singularität zur führenden zu machen:

$$f'(x) := \frac{df}{dx}$$

Hierdurch erhält man ein kritisches Verhalten:

$$f'(x) \sim B \omega |1 - x|^{\omega-1}$$

2. Die so erhaltene Reihe kann mit einer beliebigen Potenz x^{δ} beginnen. Durch Division durch diese führende Potenz erhält man eine mit einem konstanten Term beginnende Reihe:

$$g(x) := x^{-\delta} f'(x) \sim B \omega |1 - x|^{\omega-1}$$

3. Nun wird die so erhaltene Reihe gemäß Methode III auf meromorphes Verhal-
ten transformiert. Dieses geschieht durch

- (a) Bildung der logarithmischen Ableitung:

$$h(x) := \frac{d}{dx} \log g(x)$$

Hierdurch wird die Singularität zu einem einfachen Pol:

$$h(x) \sim \frac{\omega - 1}{x - 1}$$

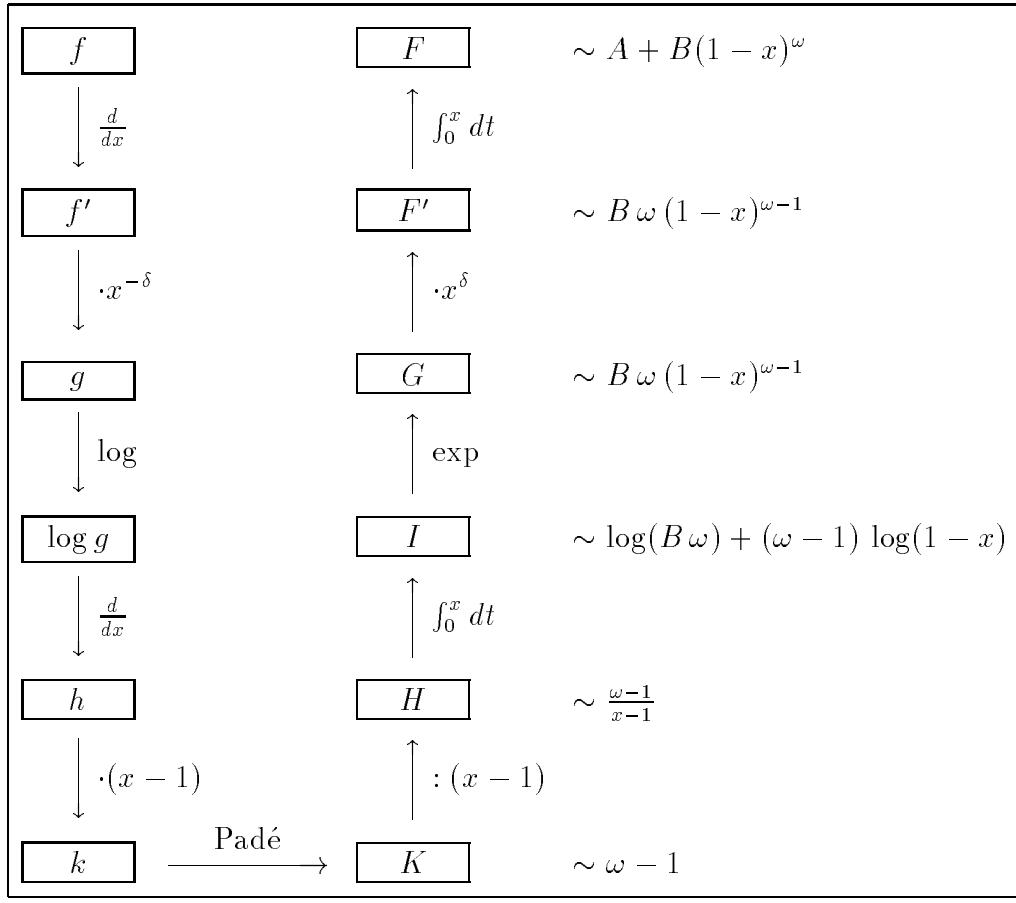


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung von Methode V

(b) Multiplikation mit $(x-1)$:

$$k(x) = (x-1)h(x)$$

Hierdurch wird die Funktion regulär im kritischen Punkt:

$$k(x) \sim \omega - 1$$

4. Von dieser Reihe werden nun Padé-Approximanten $K(x)$ gebildet.

Um Approximanten für die ursprüngliche Funktion zu erhalten, müssen nun alle obigen Umformungen rückgängig gemacht werden.

5. Division durch $(x-1)$ erzeugt wieder die Funktion:

$$H(x) := \frac{K(x)}{x-1} \sim \frac{\omega-1}{x-1}$$

6. Integration:

$$I(x) := \int_0^x H(t) dt$$

Dieses reproduziert die Funktion:

$$\log g(x) - \log g(0) = \log \frac{g(x)}{g(0)}$$

Hierbei ist $g(0)$ durch den Anfangsterm der Reihe g bekannt.

Um eine analytische Form für dieses Integral zu bekommen, wird mit Hilfe der numerisch zu bestimmenden Werte für die Polstellen und die Residuen des Bruches Partialbruchzerlegung durchgeführt.

7. Exponentiation und Multiplikation mit $g(0)$ reproduziert g .

$$G(x) := g(0) \exp(I(x))$$

8. Multiplikation mit der führenden Potenz von f' :

$$F'(x) := x^\delta G(x)$$

Man erhält so f' zurück.

9. Integration:

$$F(x) := f(x) + \int_0^x (F'(t) - f'(t)) dt$$

Hier wurde eine Null ($f(x) - f(0) - \int_0^x f'(t) dt$) eingefügt, um den Integranden bei Null divergenzfrei zu halten.

Diese Integraldarstellung ist nun der gesuchte Approximant. Das Integral kann durch numerische Berechnung entweder dazu verwendet werden, die Funktion im Bereich zwischen Null und dem kritischen Punkt wiederzugeben oder durch Auswertung an der Stelle 1 den Wert im kritischen Punkt zu bestimmen.

Bei unzureichender Kenntnis des kritischen Punktes kann man das angegebene Verfahren dennoch durchführen, indem man die Umformungen 3b und 5 wegläßt.

3.2 Test der Methoden

3.2.1 Approximation von glatten Funktionen

Als erstes Beispiel wird die Konvergenz von Padé-Approximanten an einer glatten Funktion überprüft. Hierzu wird die Exponentialfunktion verwendet. Von der

verwendete Ordnung	Bestimmung durch Polynom	Bestimmung durch Diagonalpadé
2	0.21828	-0.28172
4	0.0099485	0.0039961
6	0.00022627	-0.000028031
8	0.0000030586	0.00000011018
10	2.7313×10^{-8}	-2.7665×10^{-10}
12	1.7288×10^{-10}	4.8182×10^{-13}
14	8.1549×10^{-13}	-6.1604×10^{-16}
16	2.9763×10^{-15}	6.273×10^{-19}
18	8.6522×10^{-18}	-4.6576×10^{-22}
20	2.503×10^{-20}	2.9145×10^{-25}
22	4.360×10^{-23}	-1.5070×10^{-28}
24	6.7044×10^{-26}	6.5462×10^{-32}
26	9.5234×10^{-29}	-2.4227×10^{-35}
28	1.1700×10^{-31}	7.7302×10^{-39}
30	1.2553×10^{-34}	-2.1485×10^{-42}

Tabelle 3.1: Bestimmung von e - Tabelleneinträge enthalten die Abweichung des bestimmten Wertes von e.

bekannten Taylorreihe werden Diagonalpadé berechnet und an der Stelle 1 ausgewertet. Man erhält so Schätzwerte für e. Dadurch erhält man z.B. in 30. Ordnung:
1098127402131
403978495031

in 200. Ordnung erhält man folgende 436 richtige Stellen:

e=2.71828182845904523536028747135266249775724709369995957
4966967627724076630353547594571382178525166427427466391
9320030599218174135966290435729003342952605956307381323
2862794349076323382988075319525101901157383418793070215
4089149934884167509244761460668082264800168477411853742
34544243710753907774499206955170276183860626133138458300
07520449338265602976067371132007093287091274437470472306969
77209310141692836819025515108657463772111252389

In Tabelle 3.1 sind zu verschiedenen Ordnungen die Fehler dieser Methode derjenigen durch direkte Auswertung der Reihe in gleicher Ordnung gegenübergestellt. Obwohl die Exponentialfunktion analytisch ist, ergibt sich eine deutliche Verbesserung der Konvergenz.

Tabelle 3.2: Bestimmung von π

3.2.2 Reproduktion von einfachen Polen

Als zweites Beispiel soll nun die Fähigkeit, einfache Pole wiederzugeben, durch Approximanten an die Tangens-Funktion getestet werden. Hierbei wird die Genauigkeit der Wiedergabe der ersten positiven Polstelle und des zugehörigen Residuums überprüft. Dieses liefert zugleich eine Möglichkeit zur Bestimmung von π . Unter Ausnutzung der Reihe bis zur 32. Ordnung erhält man so durch den [16,16] Padé:

$$\pi = 3.1415926535897932384626433832840288\dots$$

Hier sind bereits 29 richtige Stellen vorhanden. In Tabelle 3.2 sind die Abweichung der doppelten Polstelle von π und die Residuen einiger Diagonalpadé aufgelistet. Man kann erkennen, daß der Fehler in der Polstelle von der gleichen Größenordnung wie der Fehler im Residuum ist.

3.2.3 Einfluß konfluenter Singularitäten

Nun wird die Funktion

$$(1-x)^{-1.25} \left(1 + A(1-x)^{0.5}\right)$$

mit Methode III für verschiedene A untersucht. Hierzu werden Diagonalpadé ausgewertet (Tabelle 3.3). Die Werte entfernen sich, wie zu erwarten, mit zunehmendem A immer weiter vom gewünschten Wert -1.25 . Auffallend ist jedoch, daß die Streuung für ein festes A nicht der Abweichung vom tatsächlichen Exponenten entspricht.

$n \setminus A$	1/4	1/2	3/4	1	5/4	3/2	7/4	2	9/4	5/2
1	1.212	1.179	1.150	1.125	1.103	1.083	1.066	1.050	1.036	1.023
2	1.226	1.205	1.185	1.167	1.150	1.135	1.120	1.107	1.095	1.083
3	1.233	1.217	1.202	1.187	1.174	1.162	1.150	1.139	1.128	1.118
4	1.236	1.224	1.211	1.200	1.189	1.179	1.168	1.158	1.149	1.141
5	1.239	1.229	1.216	1.206	1.196	1.195	1.177	1.171	1.159	1.153
6	1.238	1.229	1.215	1.206	1.196	1.190	1.175	1.171	1.158	1.142
7	1.240	1.230	1.221	1.212	1.203	1.195	1.187	1.179	1.172	1.164
8	1.240	1.233	1.220	1.086	1.201	1.195	1.182	1.211	1.171	1.176
9	1.241	1.233	1.226	1.101	1.207	1.200	1.187	1.184	1.177	1.177

Tabelle 3.3: Einfluß konfluenter Singularitäten

3.2.4 Die Energie des Ising-Modells

Es soll nun die Funktion

$$\epsilon := 3(1 - \langle s(x)s(x + \hat{\mu}) \rangle)$$

untersucht werden. Sie beschreibt die Energiedichte des Ising-Modells ohne äußeres Feld. Die Tieftemperaturreihe für die Größe $\langle s(x)s(x + \hat{\mu}) \rangle$ aus [VOH93] ist im Anhang A wiedergegeben. Es werden zu verschiedenen Temperaturen in der gebrochenen Phase die Methoden I und V mit Monte-Carlo-Werten von Klaus Pinn, die teilweise in [HP93] veröffentlicht sind, verglichen. In Abb.3.2 ist die Abweichung der Approximanten zu den gegebenen Werten dargestellt. Die numerischen Werte einiger Approximanten sowie die Monte-Carlo-Ergebnisse sind in Tabelle 3.4 enthalten. Bei den durch Methode I erhaltenen Werten nimmt die Abweichung bei Annäherung an den kritischen Punkt stark zu. So kommt es bei dem zum kritischen Punkt nächsten Temperaturwert zu einer Abweichung von etwa 0.03. Weiterhin ist zu erkennen, daß alle so erhaltenen Approximanten zu große Werte liefern. Die Streuung liefert daher hier kein geeignetes Maß für die Angabe eines Fehlers. Auch bei den durch Methode V bestimmten Werten nimmt die Abweichung zu. Hier ist jedoch nur eine Abweichung von etwa 0.005 zu beobachten. Außerdem sind auf beiden Seiten der Monte-Carlo-Werte Approximanten vorhanden, so daß eine korrekte Fehlerangabe möglich wird. Hierbei ist jedoch anzumerken, daß die Energie die Voraussetzungen zur Anwendung dieser Methode, Regularität im kritischen Punkt und Divergenz der 1.Ableitung (Wärmekapazität), gut erfüllt.

Abbildung 3.2: Diagonalapproximanten an die Energiefunktion

$\frac{u}{u_c}$	MC	Methode I [16, 16]	Methode V		
			[12, 12]	[13, 13]	[14, 14]
0.9986169572	1.018014(69)	1.055984063	1.011174646	1.010737315	1.015197957
0.9886805524	1.160796(54)	1.173020889	1.157371784	1.157158420	1.159079145
0.9867051673	1.184475(54)	1.194715874	1.181407671	1.181215929	1.182909177
0.9847337291	1.206654(75)	1.215910381	1.204509677	1.204336471	1.205838154
0.9827662298	1.228557(63)	1.236629420	1.226803092	1.226645962	1.227984304
0.9808026616	1.249743(63)	1.256895969	1.248382518	1.248239457	1.249437147
0.9768872869	1.290120(63)	1.296154507	1.289680617	1.289560989	1.290529896
0.9671670961	1.385142(48)	1.387680719	1.384226611	1.384147222	1.384742461

Tabelle 3.4: Energiefunktion

Kapitel 4

Anwendung auf das 3-dimensionale Ising-Modell

4.1 Hoch- und Tieftemperaturreihen

In der Hochtemperaturphase bilden die Reihe für χ_2 von Gaunt und Sykes [GS79] sowie die Reihen für χ_4 und μ_2 von Lüscher und Weisz [LW88] den Ausgangspunkt für die nachfolgenden Betrachtungen. Aus ihnen lassen sich mit Hilfe der in 2.2 beschriebenen Beziehungen die Reihen für die Größen $m_R, \tilde{Z}_R, g_R^{(4)}$ und $u_R^{(4)}$ berechnen. In der Tieftemperaturphase werden die Reihen von Vohwinkel [VOH93] für die im Folgenden als statistische Größen bezeichneten Größen $M, \chi_2, \chi_3, \chi_4$ und μ_2 verwendet. Aus diesen lassen sich nun wiederum mit Hilfe der Gleichungen aus 2.2 die feldtheoretischen Größen $m_R, \tilde{Z}_R, g_R^{(4)}, u_R^{(4)}, \tilde{g}_R$ und \tilde{u}_R berechnen. Dieses wird im Anhang A durchgeführt.

4.2 Der kritische Punkt

4.2.1 Hochtemperaturphase

Bestimmung mit Hilfe der Reihe für χ_2

Es soll nun mit Hilfe der Hochtemperaturreihe für χ_2 der kritische Punkt bestimmt werden. Hierzu wird, wie in II beschrieben, die logarithmische Ableitung verwendet. Von der so erhaltenen Reihe werden alle Padés gebildet, die die maximale Ordnung oder maximale Ordnung-1 ausnutzen. Nun wird eine Liste der Nullstellen der Nennerpolynome der so erhaltenen Brüche gebildet. Da die physikalische Singularität in jedem Bruch nur einmal als Polstelle auftritt, die Liste jedoch alle Polstel-

Abbildung 4.1: Auswertung der Dlog Padés von χ_2^+ zur Bestimmung von K_c

Abbildung 4.2: Ausschnitt aus Abbildung 4.1

Größe	t_c	K_c
χ_2	0.218123(12)	0.221685(13)
μ_2	0.218189(8)	0.221754(8)
χ_4	0.21814(19)	0.22170(20)
m_R	0.21821(12)	0.22178(13)
\tilde{Z}_R	0.2236(11)	0.2274(12)
g_R	0.220(7)	0.224(7)

Tabelle 4.1: Kritischer Punkt in der Hochtemperaturphase

len enthält, müssen die nicht Relevanten aus der Liste entfernt werden. Außerdem müssen Ausreißer entfernt werden, da sie sonst den später zu bildenden Mittelwert verfälschen würden. Hierzu wird die Liste sortiert, und die Werte $t(n)$ werden gegen den Listenplatz n aufgetragen, so daß ein monoton wachsender Polygonzug entsteht (Abbildung 4.1). Hier sind zwei deutliche Plateaus zu erkennen. Nun wird das physikalische (positive) Plateau erneut wie oben aufgetragen (Abbildung 4.2). Man erkennt, daß der niedrigste und der höchste Wert deutlich von den übrigen abweichen. Diese müssen also zusätzlich als Ausreißer betrachtet und daher entfernt werden. Als Ergebnis wird nun das arithmetische Mittel der restlichen Werte gebildet. Der Fehler wird als einfache Standardabweichung angegeben. Dieses Verfahren liefert so:

$$t_c = 0.218123(12)$$

Dieses entspricht:

$$K_c = 0.221685(13)$$

Andere Hochtemperaturreihen

Diese Methode wird nun auf alle betrachteten Größen im Hochtemperaturbereich angewendet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.1 aufgelistet. Bei allen Größen treten ein positives und ein negatives Plateau auf. Bei den meisten Größen ist das unphysikalische(negative) Plateau weiter vom Nullpunkt entfernt als das physikalische. Bei χ_4 und der hieraus gebildeten Kopplung g_R liegt es jedoch näher am Nullpunkt als das physikalische (Tabelle 4.2). Hierauf ist an späterer Stelle noch einzugehen.

4.2.2 Tieftemperaturphase

Nun wird dieses Verfahren auch auf die Tieftemperaturreihen angewendet. Das Ergebnis ist in Tabelle 4.3 aufgelistet. Auch hier treten zwei Niveaus auf. Die Lage der unphysikalischen Singularität ist in Tabelle 4.4 aufgelistet. Sie liegt deutlich näher am Nullpunkt als die physikalische Singularität. Die hierzugehörigen Plateaus sind

Größe	t_c
χ_2	-0.228(2)
μ_2	-0.234(1)
χ_4	-0.1484(2)
m_R	-0.229(4)
\tilde{Z}_R	-0.23(2)
g_R	-0.1480(5)

Tabelle 4.2: Unphysikalische Singularität in der Hochtemperaturphase

Größe	u_c	K_c
M	0.4118(3)	0.22180(17)
χ_2	0.4123(4)	0.22148(25)
μ_2	0.414(14)	0.220(9)
χ_3	0.412(3)	0.2216(20)
χ_4	0.418(16)	0.218(10)
m_R	0.418(12)	0.218(7)
\tilde{Z}_R	0.24(19)	0.37(21)
\tilde{g}_R	0.25(19)	0.35(19)
$g_R^{(4)}$	0.32(22)	0.29(17)

Tabelle 4.3: Kritischer Punkt in der Tieftemperaturphase

jedoch sehr unterschiedlich ausgeprägt. So sind bei χ_2, χ_3 (Abbildung 4.3), χ_4, μ_2, m_R und M beide Plateaus deutlich. Hierbei sind jedoch bei μ_2 und m_R (Abbildung 4.4) eine größere Anzahl unphysikalischer Singularitäten im durch die beiden oben beschriebenen Singularitäten begrenzten Intervall vorhanden. Hierdurch wird vor allem das positive Plateau schmäler. Bei den Größen \tilde{Z}_R und \tilde{g}_R (Abbildung 4.5) ist nur noch das negative Plateau ausgeprägt. Hier lässt sich der kritische Punkt mit dieser Methode nicht mehr bestimmen (Fehler liegt in der gleichen Größenordnung wie der Wert selbst). Bei $g_R^{(4)}$ (Abbildung 4.6) ist überhaupt kein Plateau mehr erkennbar.

Abbildung 4.3: Polstellenverteilung von χ_3^-

Abbildung 4.4: Polstellenverteilung von m_R^-

Abbildung 4.5: Polstellenverteilung von \tilde{g}_R

Abbildung 4.6: Polstellenverteilung von $g_R^{(4)}$

Größe	u_c
M	-0.2853(3)
χ_2	-0.2853(1)
μ_2	-0.2858(3)
χ_3	-0.28517(3)
χ_4	-0.28524(5)
m_R	-0.285(2)
\tilde{Z}_R	-0.286(1)
\tilde{g}_R	-0.2860(8)
$g_R^{(4)}$	-0.24(7)

Tabelle 4.4: Unphysikalische Singularität in der Tieftemperaturphase

Das gewichtete Mittel aller ausgewerteten Größen ist in der

$$\text{Hochtemperaturphase: } K_c = 0.221735(7) \quad (4.1)$$

$$\text{Tieftemperaturphase: } K_c = 0.22170(14) \quad (4.2)$$

$$\text{Insgesamt: } K_c = 0.221735(7) \quad (4.3)$$

Für die unphysikalische Singularität in der Tieftemperaturphase liefert das gewichtete Mittel:

$$u = -0.285201(25) \quad (4.4)$$

Die erhaltenen Werte für den kritischen Punkt sind in den Abbildungen 4.7 und 4.8 graphisch dargestellt. In Abbildung 4.7 sieht man, daß der erhaltene Wert für \tilde{Z}_R^+ inkonsistent mit den anderen ist. In Abbildung 4.8 sind die Werte für χ_2^+ und μ_2^+ nicht zueinander konsistent. Daher erscheint die Angabe

$$K_c = 0.22172(7) \quad (4.5)$$

für den kritischen Punkt realistischer. Hierbei wurde der Mittelwert der beiden besten Ergebnisse χ_2^+ , μ_2^+ genommen. Der Fehler wurde durch ihre Differenz bestimmt.

Der Literatur sind folgende Werte zu entnehmen:

0.22169(1)	[SGRW72]
0.221702(2)	[GG74]
0.221655(5)	[ADL83]
0.221654(6)	[PSWW84]
0.221652(4)	[BGHP92]

Hierbei sind die ersten beiden Werte mit Hilfe kürzerer Hochtemperaturreihen von χ_2^+ bestimmt worden. Diese sind nicht mit den neueren und wohl auch verlässlichen

Abbildung 4.7: Übersicht über den kritischen Punkt

Werten aus [PSWW84] und [BGHP92], die mit der Methode der Monte-Carlo-Renormierungsgruppe bestimmt wurden, konsistent. Das Ergebnis aus [ADL83] zeigt jedoch, daß mit verfeinerten Methoden aus der hier verwendeten Reihe für χ_2^+ ebenfalls ein vergleichbares Resultat erzielt werden kann. Der oben angegebene Wert ist aufgrund des großen Fehlers mit allen Literaturwerten konsistent. Bei der Analyse der einzelnen Reihen ist die Abweichung innerhalb einer Padé-Tabelle offensichtlich kein gutes Maß für den Fehler. Sie kann lediglich als Ablesegenauigkeit den Fehler nach unten beschränken. Es ist daher erstrebenswert, Resultate immer mit verschiedenen Reihen oder verschiedenen Methoden zu erzielen und dann durch Vergleich der Einzelergebnisse den Fehler festzulegen.

Im Folgenden wird für den kritischen Punkt der Literaturwert $K_c = 0.221654(6)$ aus [PSWW84] verwendet.

Abbildung 4.8: Ausschnitt aus 4.7

4.3 Kritische Exponenten

Zur Bestimmung der Exponenten stehen die zwei Verfahren II und III zur Verfügung.

4.3.1 Anwendung von Methode II

Bestimmung von γ mit Hilfe von χ_2^+

Hier werden wieder die gleichen Padé-Approximanten wie in 4.2 benutzt. Zusätzlich zu den Polstellen werden die zugehörigen Residuen bestimmt. Nun werden die Residuen gegen die zugehörigen Polstellen graphisch aufgetragen (Abbildung 4.9). Die Polstellen der physikalischen Singularität fallen in dieser Auflösung noch zu einem Punkt zusammen, während die negativen Polstellen breiter aufgespalten sind. Nun betrachtet man den Bereich der physikalischen Singularitäten in größerer Auflösung (Abbildung 4.10). Die verbleibenden Werte weisen einen nahezu linearen Zusammenhang auf. Daher wird mit Hilfe einer Ausgleichsgeraden auf den kritischen Punkt extrapoliert. Der Koordinatenursprung (in Richtung der Polstellen) wird hierbei auf den kritischen Punkt gelegt, so daß der zu bestimmende Exponent γ als negativer Achsenabschnitt dieser Geraden abgelesen werden kann. Dieses liefert:

$$\gamma = 1.2448(7) \quad (4.6)$$

Abbildung 4.9: Residuen und Polstellen von χ_2^+

Abbildung 4.10: Ausschnitt aus Abbildung 4.9

Größe	Methode II	Methode III
χ_2	-1.2448(7)	-1.2429(3)
μ_2	-2.5272(8)	-2.524(11)
χ_4	-4.380(1)	-4.377(8)
m_R	0.6387(3)	0.6388(9)
\tilde{Z}_R	0.0337(2)	0.035(4)
g_R	0.680(1)	0.678(4)

Tabelle 4.5: Kritische Exponenten in der Hochtemperaturphase

Andere Hochtemperaturreihen

Dieses Verfahren wird auf alle Hochtemperaturreihen angewendet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.5 aufgelistet. Bei der Durchführung fallen wieder die unphysikalischen Singularitäten von χ_4 auf. Vergrößert man an dieser Stelle und wertet analog dem oben beschriebenen Verfahren aus, so erhält man für $t = -1.484(2)$ als Residuum 1.00(25). Es ist daher zu vermuten, daß χ_4 hier eine einfache Nullstelle hat und daher der Konvergenzradius der ursprünglichen Reihe hierdurch nicht begrenzt wird. Diese Vermutung kann durch naive Padés bestätigt werden. Hieraus folgt natürlich auch eine Nullstelle für g_R .

Tieftemperaturphase

Größe	Methode II	Methode III
M	0.3180(4)	0.3180(12)
χ_2	-1.2751(7)	-1.275(2)
μ_2	-2.598(10)	-2.59(4)
χ_3	-2.866(9)	-2.82(3)
χ_4	-4.4(4)	-4.3(2)
m_R	0.645(10)	0.641(14)
\tilde{Z}_R	-0.08(3)	-0.03(3)
\tilde{g}_R	0.74(3)	0.67(6)
$g_R^{(4)}$	0.4(2)	1.1(16)

Tabelle 4.6: Kritische Exponenten in der Tieftemperaturphase

Auch auf die Tieftemperaturreihen wird das Verfahren angewendet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.6 dargestellt. Da in der Tieftemperaturphase die unphysikalische Singularität näher am Nullpunkt liegt als die physikalische, werden auch die Exponenten in diesem Punkt bestimmt (Tabelle 4.7).

Größe	Exponent
M	-0.0660(6)
χ_2	-1.011(4)
μ_2	-1.825(3)
χ_3	-1.992(5)
χ_4	-2.997(6)
m_R	0.3960(6)
\tilde{Z}_R	-0.2562(6)
\tilde{g}_R	0.6868(17)
$g_R^{(4)}$	1.06(4)

Tabelle 4.7: Kritische Exponenten in der unphysikalischen Singularität der Tieftemperaturphase

4.3.2 Anwendung von Methode III

Hierzu werden die Reihen, wie in III beschrieben, umgeformt. Dann werden alle Padés maximaler und submaximaler Ordnung gebildet und im kritischen Punkt ausgewertet. Die so erhaltene Liste wird analog 4.2 ausgewertet. Hier liefert jeder Approximant nur ein Listenelement, so daß nur Ausreißer entfernt werden müssen. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 4.5 und 4.6 aufgelistet.

Vergleicht man die Ergebnisse beider Methoden, so sind fast alle Werte mit ihren Fehlergrenzen zueinander konsistent. Lediglich bei χ_2^+ ist die Abweichung etwas größer, als die angegebenen Fehler zulassen. Methode II liefert durchgängig kleinere Fehler. Diese Konsistenz ist darauf zurückzuführen, daß beide Methoden sehr verwandt sind. Die Reihen unterscheiden sich nur um einen rationalen Faktor, der durch Padés gut wiedergegeben werden kann. Systematische Fehler treten daher in beiden Methoden gleichermaßen auf.

Methode II hat folgende Vorteile:

- Die Exponenten lassen sich ohne Kenntnis des kritischen Punktes auswerten. In diesem Fall ist die Genauigkeit jedoch sehr gering.
- Benutzt man wie hier einen numerischen Wert für den kritischen Punkt, so ist die Abhängigkeit von diesem explizit gegeben (Geradengleichung). Insbesondere läßt sich der durch die Ungenauigkeit des kritischen Punktes resultierende Fehler berechnen.

Abbildung 4.11: Einschränkung des Parameterraums der Exponenten durch die bestimmten Exponenten

Demgegenüber stehen folgende Vorteile von Methode III:

- Der Rechenaufwand ist geringer, da keine Polstellen und Residuen berechnet werden müssen.
- Jeder Approximant liefert einen Wert für den Exponenten, der die Information des kritischen Punktes enthält. Die Auswertung ist somit einfacher, da nicht mehr extrapoliert werden muß.

Die Skalengesetze schränken die Schar aller Exponenten auf einen zwei-dimensionalen Raum ein. Insbesondere sagen sie aus, daß die Exponenten auf beiden Seiten des kritischen Punktes für eine Größe dieselben sind. Das ist in den angegebenen Fehlern hier nicht der Fall. Die Tieftemperaturwerte weichen deutlich von den Hochtemperaturwerten ab. Dieser systematische Fehler kommt vermutlich durch die Anwesenheit konfluenter Singularitäten, die in der Tieftemperaturphase wohl vermehrt auftreten. Wie in 3.2.3 deutlich wird, reagiert die Methode hierauf relativ sensibel. Hinzu kommt in der Tieftemperaturphase noch, daß die Konvergenz der Reihe durch die

unphysikalische Singularität begrenzt wird. Daher ist den Werten aus der Hochtemperaturphase, obwohl durch kürzere Reihen bestimmt, mehr Vertrauen zu schenken. Im Folgenden wird der Raum aller durch die Skalengesetze erlaubten Exponenten durch γ und ν parametrisiert. Gibt man einen beliebigen Exponenten vor, so liegen alle mit diesem verträglichen Exponenten auf einer Geraden in der γ, ν -Ebene. Wird er nur innerhalb einer bestimmten Genauigkeit vorgegeben, so ergibt sich ein Streifen. Bestimmt man verschiedene Exponenten und gibt hierfür Fehler an, so müssen alle so erhaltenen Streifen eine gemeinsame Fläche einschließen, in der der Punkt der wahren Exponenten enthalten ist. Dieses wurde in Abb. 4.11 mit durch Methode II bestimmten Exponenten durchgeführt. Hierzu wurden die Exponenten der Hochtemperaturreihen sowie die Exponenten der Größen χ_2 und M verwendet. Das Ergebnis wirkt ernüchternd: Selbst bei Vergrößerung der Fehler mit einem Faktor 20 ergibt sich die gesuchte Fläche nicht. Da die Reihen schon bei der Berechnung des kritischen Punktes ein sehr unterschiedliches Konvergenzverhalten zeigten (Abbildungen 4.7 und 4.8) und hier die gleichen Padé-Approximanten verwendet wurden, kann man zur Bestimmung der kritischen Exponenten die dort besser konvergierenden Reihen bevorzugen. Betrachtet man daher die Schnittflächen der Reihen $\chi_2^+, \mu_2^+, \chi_4^+, m_R^+$ und M , so häufen sich diese im Bereich

$$\boxed{\gamma = 1.243(10)} \quad (4.7)$$

und

$$\boxed{\nu = 0.63(1)} \quad (4.8)$$

Neuere Literaturwerte für die Exponenten sind zum Beispiel

$$\gamma = 1.232(4) \quad (4.9)$$

$$\nu = 0.624(2) \quad (4.10)$$

aus [BGHP92]. In diesem Artikel werden die Exponenten mit Hilfe der Monte-Carlo-Renormierungsgruppe bestimmt. Außerdem werden dort die Ergebnisse ausführlich mit anderen Ergebnissen verglichen. Hier bestätigt sich, wie bei der Bestimmung des kritischen Punktes, daß erst durch Vergleich unabhängig erzielter Resultate ein zuverlässiges Ergebnis bestimmt werden kann.

Es ist anzumerken, daß es zur Bestimmung des kritischen Punktes und der Exponenten aus Reihen bessere Verfahren gibt. Insbesondere liefern bei gut konvergenten Hochtemperaturreihen Verfahren, die das asymptotische Verhalten der Koeffizienten betrachten, bessere Ergebnisse. Es wurde trotzdem dieses Verfahren gewählt, da es auf alle zu betrachtenden Reihen anwendbar ist und in der weiteren Arbeit mit Methode V ein Verfahren angewendet wird, das direkt auf dieses aufbaut.

4.4 Kritische Amplituden

4.4.1 Anwendung von Methode IV

Hier wird für alle Reihen mit Methode IV die kritische Amplitude bestimmt. Da bei diesem Verfahren die Exponenten benötigt werden, jedoch nicht exakt bekannt sind, wird es für verschiedene Werte durchgeführt. Hierzu werden $\gamma \in \{1.240, 1.245\}$ und $\nu \in \{0.63, 0.64\}$ verwendet. Nun ergeben sich alle auftretenden Exponenten aufgrund der Skalenrelationen. Bei den Größen, die γ und ν direkt als Exponenten haben, werden auch noch zusätzliche Werte verwendet ($\gamma \in \{1.235, 1.24, 1.245, 1.25\}$ und $\nu \in \{0.625, 0.630, 0.635, 0.640, 0.645\}$).

Hochtemperaturphase

Von der nach Methode IV erhaltenen Reihe werden zunächst alle Diagonal- und Nebendiagonalpadés gebildet. So erhält man einen Eindruck der Konvergenz bei zunehmender Ordnung. Um ein quantitatives Ergebnis zu erhalten, werden alle Padés maximaler und submaximaler Ordnung gebildet. Diese Werte sind für χ_2^+ mit $\gamma = 1.24$ in Tabelle 4.8 dargestellt. Nun werden, wie in 4.2 beschrieben, Ausreißer entfernt und von den verbleibenden Werten der Mittelwert und die Standardabweichung gebildet. Die so erhaltene Amplitude, die sich auf die Variable $t = \tanh(\beta) = \tanh(\frac{1}{k_B T})$ bezieht, muß noch gemäß Gleichung 2.59 auf die Variable T umgerechnet werden. Dieses erfolgt durch Multiplikation mit dem Faktor:

$$\begin{aligned} \left| \frac{T_c}{t(T_c)} \frac{dt}{dT}(T_c) \right|^\alpha &= \left| \frac{-1 - \tanh(\frac{1}{k_B T_c})^2}{k_B T_c \tanh(\frac{1}{k_B T_c})} \right|^\alpha \\ &= \left| \frac{\beta_c (1 - \tanh(\beta_c)^2)}{\tanh(\beta_c)} \right|^\alpha \\ &= 0.9679820437^\alpha \end{aligned} \quad (4.11)$$

Hierbei ist α der kritische Exponent der betrachteten Reihe. Die Ergebnisse aller betrachteten Größen ist in Tabelle 4.9 aufgelistet. In den Tabellen 4.10 und 4.11 sind die Ergebnisse der Größen, die als Exponenten γ bzw. ν haben, für zusätzliche Werte der Exponenten angegeben. Der kritische Exponent der Größe u_R ist aufgrund der Skalengesetze 0. Hierdurch wird bei der Anwendung dieser Methode die Reihe nicht verändert. Es fallen also die Methoden I und IV zusammen.

[n]	[n,n]	[n,n+1]	[n+1,n]	[n,o-n]	[n,o-1-n]
1	1.040724604	1.035394145	1.035232764	1.048640022	1.048392487
2	1.034677679	1.035297536	1.035172959	1.052630398	1.051281753
3	1.037690702	1.045230530	1.044213672	1.051805404	1.051622849
4	1.044825957	1.045182659	1.044057621	1.053599392	1.052352589
5	1.048167065	1.049872015	1.049641421	1.052964554	1.047702010
6	1.050654070	1.050678225	1.050678058	1.052252444	1.051018093
7	1.050958497	1.050677408	1.050677238	1.053410430	1.052318008
8	1.050651286	1.048173861	1.044127821	0.982419270	1.052232064
9	1.053159546	1.053090094	1.053089657	1.053090094	1.053159546
10	—	—	—	1.053089657	1.051967791
11	—	—	—	1.052398393	1.052017031
12	—	—	—	1.053377468	1.051503561
13	—	—	—	1.052339150	1.048319182
14	—	—	—	1.052834582	1.052373876
15	—	—	—	1.053187620	1.051632211
16	—	—	—	1.051786123	1.051477202
17	—	—	—	1.052321744	1.048352280
18	—	—	—	1.048539736	—

Tabelle 4.8: Padé-Tabelle für C_+ mit $\gamma = 1.24$ - Hier gibt die erste Zeile den Padé an, der gebildet wurde. Für n ist der Wert aus der ersten Spalte einzusetzen. o bezeichnet die Ordnung der Reihe (hier 14). So enthält die zweite Spalte die Diagonalpadés, die dritte und vierte die Nebendiagonale. Die fünfte enthält alle Padés mit maximaler und die sechste alle mit submaximaler Ordnung. Das Auswertungsverfahren liefert hier:

Mittelwert = 1.052358715, Standardabweichung = 0.0006997113217.

Es wurden 28 von 35 Werten berücksichtigt. Dieses Ergebnis muß noch mit einem Korrekturfaktor gemäß (4.11) multipliziert werden.

Um die Konsistenz der Methode zu überprüfen, werden die Amplituden der feldtheoretischen Größen (m_R, Z_R, g_R, u_R) aus den Amplituden der statistischen Größen (χ_2, μ_2, χ_4) gemäß der Definition dieser Größen berechnet (Tabelle 4.12). Die so erhaltenen Werte sind in ihren Fehlern bis auf wenige geringe Abweichungen konsistent mit den direkt bestimmten Werten. Dieses gibt ein gewisses Vertrauen in diese Fehler.

χ_2	α	-1.245	-1.24	-1.245	-1.24
	A	1.07323(19)	1.0957(7)	1.07323(19)	1.0957(7)
μ_2	α	-2.505	-2.50	-2.525	-2.52
	A	1.6092(24)	1.641(3)	1.4949(4)	1.52110(15)
χ_4	α	-4.38	-4.37	-4.41	-4.40
	A	-3.6001(7)	-3.7131(19)	-3.18(19)	-3.35(14)
m_R	α	0.63	0.63	0.64	0.64
	A	1.9964(27)	1.9964(27)	2.0745(9)	2.0745(9)
\tilde{Z}_R	α	0.015	0.02	0.035	0.04
	A	4.314(28)	4.388(19)	4.6194(12)	4.684(16)
g_R	α	0.63	0.63	0.64	0.64
	A	50.3(14)	50.3(14)	52.1(11)	52.1(11)
u_R	α	0	0	0	0
	A	25.1(6)	25.1(6)	25.1(6)	25.1(6)

Tabelle 4.9: Hochtemperaturamplituden

γ	1.235	1.24	1.245	1.25
C_+	1.1205(17)	1.0957(7)	1.07323(19)	1.042(8)

Tabelle 4.10: Hochtemperaturamplituden mit Exponent γ

ν	0.625	0.630	0.635	0.640	0.645
$1/f_+$	1.955(4)	1.9964(27)	2.0375(11)	2.0745(9)	2.125(30)
$A(g_R)$	49.4(15)	50.3(14)	51.3(12)	52.1(11)	53.0(10)

Tabelle 4.11: Hochtemperaturamplituden mit Exponent ν

ν	0.630	0.630	0.640	0.640
γ	1.245	1.240	1.245	1.240
$1/f_+$	2.0004(15)	2.002(2)	2.0755(3)	2.0789(7)
$A_+(\tilde{Z}_R)$	4.295(7)	4.390(11)	4.623(2)	4.736(6)
$A_+(g_R)$	50.05(15)	49.7(2)	51(3)	52(2)
u^*	25.02(6)	24.81(8)	24.6(15)	25.1(11)

Tabelle 4.12: Berechnung der feldtheoretischen Größen aus den statistischen Größen

M	α	0.3225	0.3250	0.3375	0.3400
	A	1.6325(23)	1.651(4)	1.752(13)	1.775(19)
χ_2	α	-1.245	-1.24	-1.245	-1.24
	A	0.2178(13)	0.2225(17)	0.2178(13)	0.2225(17)
χ_3	α	-2.8125	-2.8050	-2.8275	-2.8200
	A	-0.1858(10)	-0.1909(13)	-0.1753(4)	-0.1802(5)
χ_4	α	-4.38	-4.37	-4.41	-4.40
	A	0.404(7)	0.4184(55)	0.36444(32)	0.3770(27)
μ_2	α	-2.505	-2.50	-2.525	-2.52
	A	0.0815(16)	0.0829(15)	0.0769(18)	0.0781(19)
m_R	α	0.63	0.63	0.64	0.64
	A	3.929(13)	3.929(13)	4.0474(33)	4.0474(33)
\tilde{Z}_R	α	0.015	0.02	0.035	0.04
	A	3.195(31)	3.228(41)	3.35(11)	3.37(14)
\tilde{g}_R	α	0.63	0.63	0.64	0.64
	A	58.1(14)	58.1(14)	59.7(12)	59.7(12)
$g_R^{(4)}$	α	0.63	0.63	0.64	0.64
	A	340(223)	340(223)	351(228)	351.0(228)
\tilde{u}_R	α	0	0	0	0
	A	14.73(14)	14.73(14)	14.73(14)	14.73(14)
$u_R^{(4)}$	α	0	0	0	0
	A	107(36)	107(36)	107(36)	107(36)

Tabelle 4.13: Tieftemperaturamplituden

Tieftemperaturphase

In der Tieftemperaturphase wird dasselbe Verfahren verwendet. Da hier die Variable $u = e^{-4\beta} = e^{-\frac{4}{k_B T}}$ verwendet wird, muß der Korrekturfaktor gemäß Gleichung 2.59 neu bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \left| \frac{T_c}{u(T_c)} \frac{du}{dT}(T_c) \right| &= \frac{4}{k_B T_c} \\ &= 4\beta_c \\ &= 0.886616 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Die Ergebnisse in der Tieftemperaturphase sind in den Tabellen 4.13, 4.14 und 4.15 aufgelistet. Bei der Auswertung fallen die Größen $g_R^{(4)}$ und die hieraus gebildete dimensionslose Kopplung $u_R^{(4)}$ auf, da hier sehr große Werte auftreten und der Fehler in der Größenordnung der Amplitude selbst ist. Diese Methode ist daher hier nicht vernünftig anwendbar.

Bei der Berechnung der feldtheoretischen Amplituden aus den statistischen ergeben sich hier deutlichere Abweichungen zu den direkt bestimmten Amplituden.

γ	1.235	1.24	1.245	1.25
C_-	0.2274(20)	0.2225(17)	0.2178(13)	0.2132(10)

Tabelle 4.14: Tieftemperaturamplituden von Größen mit Exponent γ

ν	0.625	0.630	0.635	0.640	0.645
$\frac{1}{f_-}$	3.870(16)	3.929(13)	3.989(7)	4.047(3)	4.106(4)
$\rightarrow f_-$	0.2584(11)	0.2545(9)	0.2507(4)	0.2471(2)	0.2435(2)
$A(\tilde{g}_R)$	57.4(14)	58.1(14)	58.9(13)	59.7(12)	60.6(12)
$A(g_R^{(4)})$	352(238)	340(223)	346(226)	351(229)	356(231)

Tabelle 4.15: Tieftemperaturamplituden von Größen mit Exponent ν

4.4.2 Berücksichtigung konfluenter Beiträge

Einige Amplituden sollen nun mit einer Methode bestimmt werden, bei der konfluente Singularitäten mitberücksichtigt werden. Dieses bedeutet, daß ein Verhalten

$$f(x) \sim A \left| 1 - \frac{x}{x_c} \right|^{\alpha} \left(1 + B \left| 1 - \frac{x}{x_c} \right|^{\epsilon} \right) \quad \text{mit } \epsilon > 0 \quad (4.13)$$

zugrunde gelegt wird.

Hierzu wird zunächst, wie in Methode IV beschrieben, die Reihe durch das führende kritische Verhalten geteilt:

$$g(x) := f(x) \left| 1 - \frac{x}{x_c} \right|^{-\alpha} \quad (4.14)$$

ν	0.630	0.630	0.640	0.640
γ	1.245	1.240	1.245	1.240
$1/f_-$	4.00(4)	4.01(4)	4.12(5)	4.13(5)
$A_-(\tilde{Z}_R)$	3.49(8)	3.58(8)	3.70(10)	3.80(11)
$A_-(\tilde{g}_R)$	63(3)	64(3)	61(3)	62(3)
\tilde{u}^*	15.8(5)	15.8(5)	14.9(6)	15.0(7)
$A_-(g_R^{(4)})$	389(51)	381(51)	359(26)	359(26)
$u^{(4)})^*$	97(13)	95(13)	87(6)	87(8)

Tabelle 4.16: Berechnung der feldtheoretischen Größen aus den statistischen Größen

γ	1.240	1.245
C_+	1.113(6)	1.0748(18)
C_-	0.2292(10)	0.2233(6)
$\rightarrow \frac{C_+}{C_-}$	4.86(4)	4.814(15)

Tabelle 4.17: Konfluente Beiträge in C_+, C_-

ν	0.630	0.640
$\frac{1}{f_+}$	1.9852(18)	2.0745(18)
$\frac{1}{f_-}$	3.948(16)	4.05(3)
f_+	.5037(4)	.4820(4)
f_-	0.2533(10)	0.2471(18)
$\rightarrow \frac{f_+}{f_-}$	1.989(8)	1.951(14)

Tabelle 4.18: Konfluente Beiträge in f_+, f_-

Hieraus folgt:

$$g(x) \sim A \left(1 + B \left| 1 - \frac{x}{x_c} \right|^\epsilon \right) \quad (4.15)$$

Da dieses das zur Anwendung von Methode V notwendige Verhalten ist, kann nun mit dieser Methode die kritische Amplitude bestimmt werden.

Ein Problem hierbei ist wiederum, daß die Exponenten in die Berechnung eingehen. Um die Abhängigkeit hiervon zu überprüfen, wird das Verfahren mit verschiedenen Exponenten durchgeführt. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 4.17, 4.18 und 4.19 aufgelistet.

ν	0.630	0.640
$A(g_R^+) \text{ durch } g_R^+$	49.1(3)	51.18(19)
$\rightarrow u^*$	24.72(15)	24.67(10)
$A(g_R^+) \text{ durch } 1/g_R^+$	48.30(16)	50.57(18)
$\rightarrow u^*$	24.38(9)	24.33(9)

Tabelle 4.19: Konfluente Beiträge in g_R^+

ν	0.625	0.630	0.635	0.640	0.645
$\frac{1}{f_+}$	1.955(4)	1.996(3)	2.0375(11)	2.0745(9)	2.13(3)
f_+	0.5114(11)	0.5009(7)	0.4908(3)	0.48205(20)	0.471(7)
$A(g_R)$	49.4(15)	50.3(14)	51.3(12)	52.1(11)	53.0(10)
$\rightarrow u^*$	25.3(8)	25.2(7)	25.2(6)	25.1(5)	25.0(6)
Methode V : u^*	24.56(10)				
Methode I : u^*	25.06(60)				

Tabelle 4.20: u^* in der Hochtemperaturphase

[n]	[n,n]	[n,n+1]	[n+1,n]	[n,o-n]	[n,o-1-n]
1	18.57004875	25.25276557	28.97485696	23.86899048	—
2	26.51817639	26.17927542	25.90583485	—	—
3	—	—	—	—	—
4	—	25.40395777	24.56436812	—	—
5	24.64249675	24.59097181	24.61284936	24.55474298	24.59097181
6	24.47423427	—	—	24.47423427	24.61284936
7	—	—	—	24.57987983	23.60759807
8	—	—	—	24.61358973	24.75122620
9	—	—	—	24.45151292	24.48779900
10	—	—	—	24.44239916	—
11	—	—	—	28.08241957	—

Tabelle 4.21: Methode V, angewandt auf u_R -Mittelwert = 24.55592052, Standardabweichung = 0.09522849618, Anzahl berücksichtigter Werte = 10, Anzahl der Werte insgesamt = 13

4.5 Amplitudenverhältnisse

4.5.1 Verhältnisse in einer Phase

Hochtemperaturphase

In der Hochtemperaturphase hat die Größe $u_R = \frac{g_R}{m_R}$ aufgrund der Skalengesetze den Exponenten 0. Das kann bedeuten, daß sie im kritischen Punkt einen endlichen Wert u^* annimmt. Dieser Wert kann mit verschiedenen Methoden bestimmt werden.

- Die einfachste Möglichkeit ist, auf die Reihe Methode I anzuwenden. Dieses ergibt $u^* = 25.06(60)$.
- Mit Hilfe der schon bestimmten Amplituden der renormierten Kopplung und der renormierten Masse (Tabelle 4.11) kann man den gewünschten Wert als

Quotienten erhalten (Tabelle 4.20). Trotz starker Abhängigkeit der Einzelamplituden vom verwendeten Exponenten ist das Verhältnis hiervon relativ unabhängig.

- Dieses kann man auch mit den Werten durchführen, die unter Berücksichtigung konfluenter Singularitäten erhalten wurden (Tabelle 4.19).
- Konfluente Singularitäten kann man auch bei Verwendung der Reihe für u_R selbst durch Anwendung von Methode V berücksichtigen. Dieses liefert:

$$u^* = 24.56(10) \quad (4.16)$$

- Verwendet man hier anstelle der eigentlichen Reihe den Kehrwert, so ergibt sich:

$$u^* = 24.59(37) \quad (4.17)$$

Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.12 dargestellt. Es fällt auf, daß die Werte, die unter Berücksichtigung konfluenter Singularitäten bestimmt wurden, kleiner als die anderen sind. Außerdem ist hier die Abweichung innerhalb der Padé-Tabelle geringer. Diese Werten kommt daher größere Bedeutung zu. Da sie jedoch untereinander nicht ganz konsistent sind, muß der anzugebende Fehler größer als der der einzelnen Ergebnisse sein. Daher erscheint

$$u^* = 24.5(2) \quad (4.18)$$

angemessen. Dieser Wert ist mit allen Einzelergebnissen verträglich. In der Literatur ist diese Größe mit Hilfe der Renormierungsgruppe zu 23.73(8) [ZJ82] und 23.84(2) [BAK77] und mit Hilfe von Reihenanalysen auf dem raumzentrierten kubischen Gitter zu 24.3(3) [NS79] und 23.78 [BK81] bestimmt worden.

Tieftemperaturphase

In der Tieftemperaturphase treten die Größen $\tilde{u}_R = \frac{\tilde{g}_R}{m_R}$ und $u_R^{(4)} = \frac{g_R^{(4)}}{m_R}$ auf.

Bestimmung von \tilde{u}^*

Die direkte Bestimmung mit naiven Padés liefert:

$$\tilde{u}^* = 14.73(14) \quad (4.19)$$

Die Berechnung aus den statistischen Größen ergibt (Tabelle 4.16):

$$\tilde{u}^* = 14.9(6) \dots 15.8(5) \quad (4.20)$$

Abbildung 4.12: Zusammenstellung der Ergebnisse für u^* - Hierbei bedeutet:
verwendete Reihe Methode

A	u_R	I
B	u_R	V
C	u_R^{-1}	V
D	g_R, m_R	IV
E	g_R, m_R	IV+V
F	g_R^{-1}, m_R	IV+V

Als Quotient der Amplituden von \tilde{g}_R und m_R erhält man:

$$\tilde{u}^* = 14.8(4) \quad (4.21)$$

Es ist hier nicht möglich, Methode V anzuwenden. Dieses hat folgenden Grund. In dieser Methode wird die Reihe zunächst abgeleitet. Dann wird die logarithmische Ableitung gebildet. Hierdurch wird eine Funktion der Form $A + B|x - x_c|^\epsilon$ rational. Weicht die Form der Funktion nur wenig vom oben beschriebenen Verhalten ab, so kann man hoffen, daß die aus der so umgeformten Reihe gebildeten Padés gut konvergieren, so daß man hieraus mit zweifacher Integration die Funktion mit erhöhter Genauigkeit rekonstruieren kann. Hier konvergieren diese Padés jedoch überhaupt nicht (Tabelle 4.23). Es kann daher angenommen werden, daß eine sogeartete konfluente Singularität entweder gar nicht vorhanden ist oder nur eine sehr kleine Amplitude hat ($B \ll A$).

Da diese Methode hier ausfällt, ist es schwierig, ein korrektes Ergebnis anzuge-

ν	0.625	0.630	0.635	0.640	0.645
f_-	0.2584(11)	0.2545(9)	0.2507(4)	0.2471(2)	0.2435(2)
$A(\tilde{g}_R)$	57.4(14)	58.1(14)	58.9(13)	59.7(12)	60.6(12)
$\rightarrow \tilde{u}^*$	14.8(4)	14.8(4)	14.8(3)	14.8(3)	14.8(3)
Methode I : \tilde{u}^*			14.73(14)		

Tabelle 4.22: \tilde{u}^*

ben. Der Quotient der Amplituden für m_R und \tilde{g}_R bestätigt das Ergebnis von Methode I. Die Berechnung aus den statistischen Amplituden zeigt jedoch eine deutliche Abweichung. Da zwei Werte zusammenliegen, kann man diese als Ergebnis betrachten, wobei der Fehler jedoch so groß angegeben werden sollte, daß er mit dem dritten Wert konsistent ist. Hieraus ergibt sich

$$\boxed{\tilde{u}^* = 14.8(5)} \quad (4.22)$$

Bestimmung von $u^{(4)*}$

Bei dieser Größe liefert Methode I:

$$u^{(4)*} = 107(36) \quad (4.23)$$

In Tabelle 4.24 wird das Verhältnis aus den Amplituden der Kopplung $g_R^{(4)}$ und der Masse m_R gebildet. Beide Fälle liefern kein befriedigendes Resultat, da der relative Fehler sehr groß ist. Bei der Berechnung aus den statistischen Amplituden ergibt sich aufgrund der Fehlerfortpflanzung ein kleinerer Fehler (Tabelle 4.16). Methode V ist wiederum nicht anwendbar.

Aufgrund der vorliegenden Werte kann man nur die Größenordnung angeben:

$$\boxed{u^{(4)*} = 90(20)} \quad (4.24)$$

Nun stellt sich die Frage, warum die hier betrachteten Methoden nicht vernünftig auf die Reihen von $g_R^{(4)}$ und $u_R^{(4)}$ anwendbar sind. Eine mögliche Antwort erhält man, wenn man sich die Polstruktur der logarithmischen Ableitung von $g_R^{(4)}$ ansieht. In Abbildung 4.13 sind die Polstellen aller Padés maximaler und submaximaler Ordnung als Punkte in der komplexen Ebene dargestellt. Man sieht deutlich, daß sich in den Bereichen $\frac{u}{u_c} = 0.25 \pm 0.15i$ die Polstellen häufen. (Die Polstellen treten immer zu komplex konjugierten Paaren auf, da sie Nullstellen der reellen Nennerpolynome sind.) Es ist daher anzunehmen, daß die komplexe Fortsetzung der Funktion $g_R^{(4)}$ an diesen Stellen Singularitäten aufweist. Hierdurch wird es sehr schwer, die Funktion durch ihre Taylorentwicklung im Ursprung zu beschreiben, da sie durch den engen Bereich zwischen diesen Singularitäten hindurch fortgesetzt werden muß.

[n]	[n,n]	[n,n+1]	[n+1,n]	[n,o-n]	[n,o-1-n]
1	2.092021997	1.236688179	-0.96398049	-0.000000689	0.0000012924
2	1.368282742	1.276317652	1.098257770	0.0000126031	0.000034293
3	1.324821394	1.263851740	-3.71531542	-0.000162081	-0.000821127
4	3.836759835	-0.48468344	44.08281346	0.0051039612	0.0255655852
5	-2.23619512	0.563309382	-7.44073586	-0.118548228	-1.085471099
6	-7.16105046	-8.61574311	-7.38871970	-0.305032990	-0.17707369
7	-7.34138998	-5.71463745	-7.39207694	-0.225403833	-0.45328175
8	-7.25855861	-21.3638527	-7.38038793	0.9129779361	-0.14564941
9	113.0875053	-14.3223632	-1.69645693	0.3586706512	9.498398323
10	-15.558807	-14.3172730	-1.02854500	-41.97555993	-14.3172730
11	-68.180213	-	-	-68.18021359	-1.02854500
12	-	-	-	-11.42789617	-24.0961623
13	-	-	-	12.96108043	16.57918865
14	-	-	-	13.23560001	6.110319271
15	-	-	-	10.24989325	18.97033783
16	-	-	-	19.05685901	18.96872660
17	-	-	-	133.5568034	-189.8695138
18	-	-	-	-1325.94418	39597.64118
19	-	-	-	16004.55398	27443.71341
20	-	-	-	-381891.064	-7994101.42
21	-	-	-	-706370.413	-

Tabelle 4.23: Methode III, angewandt auf $\frac{d\tilde{u}_R}{du}$

4.5.2 Verhältnisse aus zwei Phasen

Hier gibt es zunächst zwei Ansätze zur Bestimmung von Amplitudenverhältnissen:

1. Division der in den einzelnen Phasen bestimmten Amplituden
2. Division der Reihen

Division der Amplituden

Bei der direkten Division der Amplituden muß man beachten, daß bei der Bestimmung der Einzelamplituden die kritischen Exponenten eingehen. Sie kann daher für verschiedene Exponenten durchgeführt werden. In Tabelle 4.25 wird das Verhältnis $\frac{C_+}{C_-}$ aus den Werten der Tabellen 4.10 und 4.14 berechnet. In Tabelle 4.26 wird dieses für $\frac{f_+}{f_-}$ mit den Werten aus den Tabellen 4.11 und 4.15 durchgeführt.

ν	0.625	0.630	0.635	0.640	0.645
f_-	0.2584(11)	0.2545(9)	0.2507(4)	0.2471(2)	0.2435(2)
$A^-(g_R^{(4)})$	352(238)	340(223)	346(226)	351(229)	356(231)
$\rightarrow u^{(4)*}$	91(62)	87(57)	87(57)	87(57)	87(56)
Methode I : $u^{(4)*}$	107(36)				

Tabelle 4.24: $u^{(4)*}$

Abbildung 4.13: Komplexe Pole der Kopplung $g_R^{(4)}$

Division der Reihen

Hier wird folgendermaßen vorgegangen:

- In den beiden Reihen wird die jeweilige Variable (t bzw. u) durch $x = \frac{t}{t_c}$ bzw. $x = \frac{u}{u_c}$ ersetzt. Dieses ändert das kritische Verhalten nicht, hat aber zur Folge, daß der kritische Punkt für beide Reihen an der Stelle 1 liegt. Problematisch ist hierbei, daß ein numerischer Wert für den kritischen Punkt eingeht. Hierzu wurde die Methode stichprobenartig mit $\beta_c = 0.22165$ und $\beta_c = 0.22166$ durchgeführt. Die erhaltenen Abweichungen waren in allen Fällen kleiner als der angegebene Fehler.
- Nun werden die beiden Reihen durcheinander dividiert und neu entwickelt.

γ	1.235	1.24	1.245	1.25
C_+	1.1205(17)	1.0957(7)	1.07323(19)	1.042(8)
C_-	0.2274(20)	0.2225(17)	0.2178(13)	0.2132(10)
$\rightarrow \frac{C_+}{C_-}$	4.93(4)	4.92(4)	4.93(3)	4.89(4)

Tabelle 4.25: $\frac{C_+}{C_-}$

ν	0.625	0.630	0.635	0.640	0.645
$\frac{f_+}{f_-}$	1.955(4)	1.996(3)	2.0375(11)	2.0745(9)	2.13(3)
$\frac{f_-}{f_+}$	3.870(16)	3.929(13)	3.989(7)	4.047(3)	4.106(4)
$\rightarrow f_+$	0.5114(11)	0.5009(7)	0.4908(3)	0.48205(20)	0.471(7)
$\rightarrow f_-$	0.2584(11)	0.2545(9)	0.2507(4)	0.2471(2)	0.2435(2)
$\rightarrow \frac{f_+}{f_-}$	1.979(9)	1.968(7)	1.958(3)	1.9511(18)	1.93(3)

Tabelle 4.26: $\frac{f_+}{f_-}$

- Da beide Reihen den gleichen kritischen Exponenten besaßen, beschreibt die so erhaltene Reihe eine Funktion, die an der Stelle 1 einen endlichen Wert annimmt. Dieser kann nun mit Hilfe der Methoden I und V bestimmt werden.
- Dieses ist jedoch noch nicht das gewünschte Amplitudenverhältnis, da noch Korrekturfaktoren durch die verwendeten Variablen in den einzelnen Phasen, gemäß Gleichung 2.59, berücksichtigt werden müssen. Dieses liefert einen Faktor

$$\left(\underbrace{\frac{1 - t_c^2}{4 t_c}}_{=: k_{\pm}} \right)^{\alpha}$$

Hieraus folgt, daß auch hier die kritischen Exponenten in die Ergebnisse eingehen.

Ein Nachteil dieses Verfahrens ist, daß die Ordnung der erhaltenen Reihe lediglich die minimale Ordnung der ursprünglichen Reihen ist. Die höheren Terme der Tieftemperaturreihen bleiben hierbei somit unberücksichtigt. Dieses kann man verbessern, indem man in der Hochtemperaturreihe $u = x^2 u_c$ substituiert. Hierdurch erhält man dann jedoch noch den zusätzlichen Faktor $2^{-\alpha}$ für das zu bestimmende Verhältnis. Zur Kontrolle kann man noch die Kehrwerte der so erhaltenen Reihen berechnen und ebenfalls auswerten.

Verwendete Reihe	Korrekturfaktor (k)	$\frac{1}{k} \frac{C_+}{C_-}$	
		Methode I	Methode V
$\frac{x_2^+(x t_c)}{x_2^-(x u_c)}$	$k_{\pm}^{-\gamma}$	5.60(5)	5.459(11)
$\frac{x_2^-(x u_c)}{x_2^+(x t_c)}$	$k_{\pm}^{-\gamma}$	5.60(5)	5.40(3)
$\frac{x_2^+(x^2 t_c)}{x_2^-(x u_c)}$	$(0.5 k_{\pm})^{-\gamma}$	2.323(20)	2.283(12)
$\frac{x_2^-(x u_c)}{x_2^+(x^2 t_c)}$	$(0.5 k_{\pm})^{-\gamma}$	2.323(20)	2.271(7)

Tabelle 4.27: Ergebnisse für $\frac{C_+}{C_-}$ durch Reihendivision

Verwendete Reihe	Korrekturfaktor (k)	$\frac{1}{k} \frac{f_+}{f_-}$	
		Methode I	Methode V
$\frac{m_R^+(x t_c)}{m_R^-(x u_c)}$	$k_{\pm}^{-\nu}$	2.066(4)	2.063(6)
$\frac{m_R^-(x u_c)}{m_R^+(x t_c)}$	$k_{\pm}^{-\nu}$	2.066(4)	2.059(14)
$\frac{m_R^+(x^2 t_c)}{m_R^-(x u_c)}$	$(0.5 k_{\pm})^{-\nu}$	1.3216(12)	1.321(4)
$\frac{m_R^-(x u_c)}{m_R^+(x^2 t_c)}$	$(0.5 k_{\pm})^{-\nu}$	1.3216(12)	1.318(5)

Tabelle 4.28: Ergebnisse für $\frac{f_+}{f_-}$ durch Reihendivision

Vergleich der Ergebnisse für $\frac{C_+}{C_-}$

Sämtliche Ergebnisse sind in Abbildung 4.14 dargestellt. Zunächst fällt auf, daß die Ergebnisse nicht alle in den aufgrund der Schwankungen innerhalb der Padé Tabelle zustande gekommenen Fehlern konsistent sind.

Bei den durch Reihendivision erhaltenen Werten wird erwartungsgemäß der Fehler kleiner, wenn man, wie in 4.5.2 beschrieben, in der Hochtemperaturreihe die Substitution $x \rightarrow x^2$ durchführt.

Weiterhin sieht man, daß die mit Hilfe von Methode V gewonnenen Werte (C,D,E,F aus Tabelle 4.27) systematisch kleiner sind als die mit Hilfe von Methode I (A,B ebenfalls aus Tabelle 4.27) aus den gleichen Reihen gewonnenen Werte. Hierbei ist noch anzumerken, daß Methode I im Gegensatz zu Methode V auf den Kehrwert einer Reihe nichts Neues liefert ($f_{[n,m]} = \frac{1}{(\frac{1}{f})_{[m,n]}}$). Auch bei der Division der Einzelamplituden ist das Ergebnis unter Berücksichtigung konfluenter Beiträge (H aus Tabelle 4.17) kleiner als das direkt erhaltene (G aus Tabelle 4.25). Da diese Tendenz bei beiden Methoden vorhanden ist, ist zu vermuten, daß ein ausgeprägter konfluenter Beitrag vorhanden ist.

Aus dem bisher Gesagten folgt, daß in diesem Falle die Ergebnisse E,F und H zu bevorzugen sind. Das gewichtete Mittel dieser drei Ergebnisse liefert für

$$\gamma = 1.24 : 4.816(12) \quad (4.25)$$

$$\gamma = 1.245 : 4.818(9) \quad (4.26)$$

Die angewandte Fehlerrechnung erscheint jedoch nicht ganz angemessen, da es sich nicht um normalverteilte Zufallszahlen handelt. Betrachtet man die Abweichung der einzelnen Werte untereinander, so erscheint es in beiden Fällen angemessener

$$\boxed{\frac{C_+}{C_-} = 4.82(5)} \quad (4.27)$$

anzugeben.

Dieser Wert liegt zwischen den mit Hilfe der Renormierungsgruppe erhaltenen Werten 4.8 aus [BGZJ74] und 4.77(30) aus [BBMN87] und den durch Reihenanalysen erhaltenen Ergebnissen 5.01(5) aus [TF75] und 4.95(15) aus [LF89].

Abbildung 4.14: Zusammenstellung der Ergebnisse für $\frac{C_+}{C_-}$ - Hierbei bedeutet:

Verwendete Reihe Methode

- | | | |
|---|---|---|
| A | $\chi_2^+(x t_c) / \chi_2^-(x u_c)$ | I |
| B | $\chi_2^+(x^2 t_c) / \chi_2^-(x u_c)$ | I |
| C | $\chi_2^+(x t_c) / \chi_2^-(x u_c)$ | V |
| D | $\chi_2^-(x u_c) / \chi_2^+(x t_c)$ | V |
| E | $\chi_2^+(x^2 t_c) / \chi_2^-(x u_c)$ | V |
| F | $\chi_2^-(x u_c) / \chi_2^+(x^2 t_c)$ | V |
| G | Division der Einzelamplituden | |
| H | Division der Einzelamplituden bei Berücksichtigung konfluenter Beiträge | |

Vergleich der Ergebnisse für $\frac{f_+}{f_-}$

Die Ergebnisse für diese Größe sind in Abbildung 4.15 dargestellt. Hier ergibt die Berücksichtigung konfluenter Singularitäten keine Verbesserung der Ergebnisse. Die Streuung der Padé Tabellen ist bei Methode I (A,B aus Tabelle 4.28) sogar kleiner als bei Anwendung von Methode V (C,D,E,F ebenfalls aus Tabelle 4.28). Auch bei der Division der Einzelamplituden ergibt die direkte Bestimmung (G aus Tabelle 4.26) einen kleineren Fehler als die Berücksichtigung konfluenter Singularitäten (H aus Tabelle 4.18). Daher sind hier die Ergebnisse aus A,B und G zu bevorzugen. Hierbei ist wiederum, wie schon oben erwähnt, das Ergebnis B aufgrund der längeren Reihe dem Ergebnis A vorzuziehen. B ergibt:

$$\nu = 0.625 : \frac{f_+}{f_-} = 1.9293(17) \quad (4.28)$$

$$\nu = 0.63 : \frac{f_+}{f_-} = 1.9351(17) \quad (4.29)$$

Da die Division der Einzelamplituden jedoch stark abweichende Ergebnisse liefert, ist der angegebene Fehler wohl zu klein. Unter Berücksichtigung beider Verfahren erscheint

$$\boxed{\frac{f_+}{f_-} = 1.94(3)} \quad (4.30)$$

realistischer.

Auch hier liegt der so gewonnene Wert zwischen den Ergebnissen, die mit Hilfe der Renormierungsgruppe gewonnen wurden (1.91 aus [BGZJ74]), und früheren Reihenanalysen (1.96(3) aus [TF75] und 1.96(1) aus [LF89]).

Abbildung 4.15: Zusammenstellung der Ergebnisse für $\frac{f_+}{f_-}$ - Hierbei bedeutet:
 Verwendete Reihe Methode

- A $m_R^+(x t_c)/m_R^-(x u_c)$ I
- B $m_R^+(x^2 t_c)/m_R^-(x u_c)$ I
- C $m_R^+(x t_c)/m_R^-(x u_c)$ V
- D $m_R^-(x u_c)/m_R^+(x t_c)$ V
- E $m_R^+(x^2 t_c)/m_R^-(x u_c)$ V
- F $m_R^-(x u_c)/m_R^+(x^2 t_c)$ V
- G Division der Einzelamplituden
- H Division der Einzelamplituden bei Berücksichtigung konfluenter Beiträge

Kapitel 5

Zusammenfassung

Ausgehend von den Hoch- und Tieftemperaturreihen für die Suszeptibilitäten, das zweite Moment und die Magnetisierung wurden die Reihen für die renormierte Masse, die Wellenfunktionsrenormierungskonstante und zwei verschiedene Kopplungen ($g_R^{(4)}$ und \tilde{g}_R) berechnet. Dann wurden durch jede dieser 15 Reihen der kritische Punkt sowie der kritische Exponent und die kritische Amplitude bestimmt. Die Reihen verhielten sich sehr unterschiedlich und ergaben teilweise inkonsistente Ergebnisse. Diesen Werten ist daher nur sehr begrenzt zu vertrauen. Erst durch Vergleich unabhängiger Werte lassen sich verlässliche Resultate angeben. Die im folgenden angegebenen Werte sind daher stets durch Vergleich mit verschiedenen Methoden oder Reihen bestimmter Werte erhalten worden. So konnte der kritische Punkt zu

$$K_c = 0.22172(7) \quad (5.1)$$

bestimmt werden. Die kritischen Exponenten ergaben sich unter der Annahme der hier nicht gut bestätigten Skalenrelationen zu

$$\gamma = 1.243(10) \quad (5.2)$$

$$\nu = 0.63(1) \quad (5.3)$$

Weiterhin wurden Amplitudenverhältnisse bestimmt. Hierbei konnte man entweder die Einzelamplituden dividieren oder eine durch Reihendivision erhaltene Reihe untersuchen. Die zweite Möglichkeit hat hierbei den Vorteil, daß die Abhängigkeit vom verwendeten Exponenten explizit gegeben ist. In beiden Fällen wurden jeweils die zwei folgenden Methoden verwendet, bei denen zunächst die Reihe durch die führende Singularität geteilt wird, um ein reguläres Verhalten im kritischen Punkt zu bekommen:

- Von der so erhaltenen Reihe werden direkt Padé-Approximanten gebildet. Dieses Verfahren macht keine Voraussetzungen an das konfluente Verhalten der Größe und ist daher nahezu auf jede Reihe anwendbar. Ist jedoch ein konfluerenter Anteil vorhanden, so kommt es zu deutlichen systematischen Fehlern, die schlecht abgeschätzt werden können.

- Es wird ein Verfahren verwendet, bei dem die Amplitude durch zweifache Integration erhalten wird. Hierbei kann ein konfluentes Verhalten berücksichtigt werden, so daß bei Anwesenheit einer solchen konfluenten Singularität die Ergebnisse verbessert werden.

Dieses lieferte in der Hochtemperaturphase für die dimensionslose Kopplung:

$$u^* = 24.5(2) \quad (5.4)$$

In der Tieftemperaturphase ergab sich:

$$u_R^{(4)} = 90(20) \quad (5.5)$$

$$\tilde{u}_R = 14.8(5) \quad (5.6)$$

Außerdem wurden die Verhältnisse aus beiden Phasen für die Suszeptibilitäten ($\frac{C_+}{C_-}$) und für die Korrelationslänge ($\frac{f_+}{f_-}$) zu

$$\frac{C_+}{C_-} = 4.82(5) \quad (5.7)$$

$$\frac{f_+}{f_-} = 1.94(3) \quad (5.8)$$

bestimmt.

Literaturverzeichnis

- [ADL83] J. ADLER. Critical temperatures of the $d = 3$, $s = 1/2$ ising model; the effect of confluent corrections to scaling. *J.Phys A* **16** (1983) 3585.
- [BAK61] G.A. BAKER, JR. Application of the padé method to the investigation of some magnetic properties of the ising model. *Phys.Rev.* **124** (1961) 768.
- [BAK75] G.A. BAKER, JR., editor. *Essentials of Padé Approximants*. Academic Press, New York, 1975.
- [BAK77] G.A. BAKER, JR. Analysis of hyperscaling in the ising model by the high-temperature series method. *Phys. Rev.* **B15** (1977) 1552.
- [BBMN87] C. BAGNULS, C. BERVILLIER, D.I. MEIRON, and B.G. NICKEL. Non-asymptotic critical behavior from field theory at $d = 3$; ordered-phase case. *Phys. Rev.* **B 35** (1987) 3585.
- [BGHP92] C.F. BAILLIE, R. GUPTA, K.A. HAWICK, and G.S. PAWLEY. Monte carlo renormalization-group study of the three-dimensional ising model. *Phys. Rev.* **B 45** (1992) 45.
- [BGZJ74] E. BRÉZIN, J.C. LE GUILLOU, and J. ZINN-JUSTIN. Universal ratios of critical amplitudes near four dimensions. *Phys. Lett.* **47 A** (1974) 285.
- [BK81] G.A. BAKER, JR and J.M. KINCAID. The continuous-spin ising model, $g_0 : \phi^4 :_d$ field theory, and the renormalization group. *J. Stat. Phys.* **24** (1981) 469.
- [BM89] B. BAUMANN and G. MÜNSTER. string tension in a lattice model of random surfaces. *Nucl. Phys.* **B326** (1989) 689.
- [BRU67] S.G. BRUSH. History of the lenz-ising model. *Rev. mod. Phys.* **39** (1967) 883.
- [DOM74] C. DOMB. Ising model. In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. DOMB and M.S. GREEN, volume 3. Academic Press, London, 1974.

- [FIS67] M.E. FISHER. The theory of equilibrium critical phenomena. *Rep. Prog. Phys.* **30** (1967) 615.
- [GG74] D.S. GAUNT and A.J. GUTTMANN. Asymptotic analysis of coefficients. In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. DOMB and M.S. GREEN, volume 3. Academic Press, London, 1974.
- [GS79] D.S. GAUNT and M.F. SYKES. The critical exponent γ for the three-dimensional ising model. *J.Phys. A* **12** (1979) L25.
- [GUT89] A. J. GUTTMANN. Asymptotic analysis of power-series expansions. In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. DOMB and J.L. LEBOWITZ, volume 3. Academic Press, London, 1989.
- [HAHS76] P.C. HOHENBERG, A. AHARONY, B.I. HALPERIN, and E.D. SIGGIA. Two-scale-factor universality and the renormalization group. *Phys. Rev. B* **13** (1976) 2987.
- [HP93] MARTIN HASENBUSCH and KLAUS PINN. Surface tension, surface stiffness, and surface width of the 3-dimensional ising model on a cubic lattice. *Physica A* **192** (1993) 342.
- [HUA87] K. HUANG. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, New York, 2nd edition, 1987.
- [ISI25] E. ISING. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Z. Phys.* **31** (1925) 253.
- [LF89] A.J. LIU and M.E. FISHER. The three-dimensional ising model revisited numerically. *Physica A* **156** (1989) 35.
- [LW88] M. LÜSCHER and P. WEISZ. Application of the linked cluster expansion to the n-component ϕ^4 theory. *Nucl. Phys. B* **300** (1988) 325.
- [MM93] I. MONTVAY and G. MÜNSTER. *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, Cambridge, 1st edition, 1993.
- [NS79] B. NICKEL and B. SHARPE. On hyperscaling in the ising model in three dimensions. *J. Phys. A* **12** (1979) 1819.
- [ONS44] L. ONSAGER. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.* **65** (1944) 117.
- [PAD92] H. PADÉ. Sur la représentation approchée d'une fonction pour des fraction rationnelles. *Ann. Sci. École Norm. Sup. Suppl.[3]* **9** (1892) 1.
- [PSWW84] G.S. PAWLEY, R.H. SWENDSEN, D.J. WALLACE, and K.G. WILSON. Monte carlo renormalization-group calculations of critical behavior in the simple-cubic ising model. *Phys. Rev. B* **29** (1984) 4030.

- [SFW72] D. STAUFFER, M. FERER, and M. WORTIS. Universality of second-order phase transitions: The scale factor for the correlation length. *Phys. Rev. Lett.* **29** (1972) 345.
- [SGRW72] M.F. SYKES, D.S. GAUNT, P.D. ROBERTS, and J.A. WYLES. High temperature series for the susceptibility of the ising model ii. *J.Phys. A* **5** (1972) 640.
- [TF75] H.B. TARKO and M.E. FISHER. Theorie of critical point scattering and correlations; the ising model below t_c and in a field. *Phys. Rev. B* **11** (1975) 1217.
- [VOH93] C. VOHWINKEL. Yet another way to obtain low temperature expansions for discrete spin systems. *Phys. lett. B* **301** (1993) 208.
- [WIL83] K.G. WILSON. The renormalization group and critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.* **55**(3) (1983) 883.
- [YEO92] J.M. YEOMANS. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford University Press, Oxford, 1st edition, 1992.
- [ZJ82] J. ZINN-JUSTIN. Calculation of critical exponents from field theory. In *Phase Transitions, Cargèse 1980*, edited by M. LÉVY et al., New York, 1982. Plenum Press.

Anhang A

Die Reihen

A.1 Hochtemperaturphase

Die längste Reihe für die Suszeptibilität χ_2 ist von Gaunt und Sykes [GS79]. Die hier nicht wiedergegebenen Koeffizienten niedriger Ordnung sind in [SGRW72] abgedruckt. Sie verwendet als Entwicklungsparameter die Variable $t := \tanh K = \tanh \beta J$.

$$\begin{aligned} \chi_2(t) = & 1 + 6t + 30t^2 + 150t^3 + 726t^4 + 3510t^5 + 16710t^6 + 79494t^7 \\ & + 375174t^8 + 1769686t^9 + 8306862t^{10} + 38975286t^{11} + 182265822t^{12} \\ & + 852063558t^{13} + 3973784886t^{14} + 18527532310t^{15} \\ & + 86228667894t^{16} + 401225368086t^{17} + 1864308847838t^{18} \\ & + 8660961643254t^{19} + \mathcal{O}(t^{20}) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Für die anderen Größen stehen Reihen von Lüscher und Weisz [LW88] zur Verfügung. Sie sind mit Entwicklungsparameter $K = \beta J$ angegeben.

$$\begin{aligned} \chi_2(K) = & 1 + 6K + 30K^2 + 148K^3 + 706K^4 + \frac{16804K^5}{5} + \frac{47260K^6}{3} \\ & + \frac{7744136K^7}{105} + \frac{35975026K^8}{105} + \frac{1502899924K^9}{945} + \frac{6942884236K^{10}}{945} \\ & + \frac{1763022244376K^{11}}{51975} + \frac{24340522634492K^{12}}{155925} \\ & + \frac{1455564288731288K^{13}}{2027025} + \frac{9352060224330104K^{14}}{2837835} + \mathcal{O}(K^{15}) \quad (\text{A.2}) \\ \mu_2(K) = & 6K + 72K^2 + 580K^3 + 3984K^4 + \frac{124804K^5}{5} + \frac{738256K^6}{5} \\ & + \frac{17603848K^7}{21} + \frac{161679008K^8}{35} + \frac{23502612244K^9}{945} \end{aligned}$$

$$+\frac{207084686896 K^{10}}{1575} + \frac{7118350956184 K^{11}}{10395} + \frac{183105409684576 K^{12}}{51975} \\ + \frac{36357148765588568 K^{13}}{2027025} + \frac{428105990895623072 K^{14}}{4729725} + \mathcal{O}(K^{15}) \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \chi_4(K) = & -2 - 48 K - 636 K^2 - 6464 K^3 - 55892 K^4 - \frac{2174432 K^5}{5} \\ & - \frac{47009464 K^6}{15} - \frac{2239468288 K^7}{105} - \frac{14570710772 K^8}{105} \\ & - \frac{823130010272 K^9}{945} - \frac{25080975789304 K^{10}}{4725} - \frac{1640401398782848 K^{11}}{51975} \\ & - \frac{28654566671774104 K^{12}}{155925} - \frac{2130434175575247424 K^{13}}{2027025} \\ & - \frac{83969257269976828688 K^{14}}{14189175} - \mathcal{O}(K^{15}) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Transformation auf die natürliche Variable $t = \tanh(K)$ ergibt:

$$\begin{aligned} \chi_2(t) = & 1 + 6 t + 30 t^2 + 150 t^3 + 726 t^4 + 3510 t^5 + 16710 t^6 + 79494 t^7 \\ & + 375174 t^8 + 1769686 t^9 + 8306862 t^{10} + 38975286 t^{11} + 182265822 t^{12} \\ & + 852063558 t^{13} + 3973784886 t^{14} + \mathcal{O}(t^{15}) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} \mu_2(t) = & 6 t + 72 t^2 + 582 t^3 + 4032 t^4 + 25542 t^5 + 153000 t^6 + 880422 t^7 \\ & + 4920576 t^8 + 26879670 t^9 + 144230088 t^{10} + 762587910 t^{11} \\ & + 3983525952 t^{12} + 20595680694 t^{13} + 105558845736 t^{14} + \mathcal{O}(t^{15}) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} \chi_4(t) = & -2 - 48 t - 636 t^2 - 6480 t^3 - 56316 t^4 - 441360 t^5 - 3208812 t^6 \\ & - 22059120 t^7 - 145118844 t^8 - 921726704 t^9 - 5687262012 t^{10} \\ & - 34255147920 t^{11} - 202130397708 t^{12} - 1171902072144 t^{13} \\ & - 6691059944460 t^{14} + \mathcal{O}(t^{15}) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Hieraus lassen sich die Reihen für die feldtheoretischen Größen bilden:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_R = & t^{-1} - t - 8 t^3 - 104 t^5 - 64 t^6 - 1344 t^7 - 1408 t^8 - 19528 t^9 \\ & - 27584 t^{10} - 313224 t^{11} - 521248 t^{12} + \mathcal{O}(t^{13}) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} m_R = & \frac{1}{\sqrt{t}} - 3 \sqrt{t} - 2 t^{3/2} - 6 t^{5/2} - 12 t^{7/2} - 48 t^{9/2} - 118 t^{11/2} - 554 t^{13/2} \\ & - 1466 t^{15/2} - 7622 t^{17/2} - 20778 t^{19/2} - 114462 t^{21/2} - 320888 t^{23/2} \\ & - 1809972 t^{25/2} + \mathcal{O}(t^{27/2}) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} g_R = & \frac{2}{t^2} - 40 + 96 t - 570 t^2 + 2400 t^3 - 12432 t^4 + 51296 t^5 - 223232 t^6 \\ & + 910176 t^7 - 3976752 t^8 + 16348384 t^9 - 71720688 t^{10} \\ & + 298937696 t^{11} + \mathcal{O}(t^{12}) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} u_R = & \frac{2}{t^{3/2}} + \frac{6}{\sqrt{t}} - 18 \sqrt{t} + 66 t^{3/2} - 348 t^{5/2} + 1548 t^{7/2} - 7780 t^{9/2} \\ & + 30708 t^{11/2} - 134256 t^{13/2} + 545872 t^{15/2} - 2386056 t^{17/2} \\ & + 9774504 t^{19/2} - 43144164 t^{21/2} + 178630692 t^{23/2} + \mathcal{O}(t^{25/2}) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Man sieht, daß die Länge der Reihen für die feldtheoretischen Größen durch die Länge der Reihe für μ_2 begrenzt wird, da diese nicht mit einem konstanten Term beginnt und dadurch nur weniger existierende Ordnungen bekannt sind.

A.2 Tieftemperaturphase

In der gebrochenen Phase werden die folgende Reihen von Vohwinkel [VOH93] mit Entwicklungsparameter $u = e^{-4K}$ verwendet:

$$\begin{aligned} M &= 1 - 2u^3 - 12u^5 + 14u^6 - 90u^7 + 192u^8 - 792u^9 + 2148u^{10} \\ &\quad - 7716u^{11} + 23262u^{12} - 79512u^{13} + 252054u^{14} - 846628u^{15} \\ &\quad + 2753520u^{16} - 9205800u^{17} + 30371124u^{18} - 101585544u^{19} \\ &\quad + 338095596u^{20} - 1133491188u^{21} + 3794908752u^{22} \\ &\quad - 12758932158u^{23} + 42903505030u^{24} - 144655483440u^{25} \\ &\quad + 488092130664u^{26} - 1650000819068u^{27} + 5583090702798u^{28} \\ &\quad - 18918470423736u^{29} + 64167341172984u^{30} \\ &\quad - 217893807812346u^{31} + 740578734923544u^{32} + \mathcal{O}(u^{33}) \end{aligned} \tag{A.12}$$

$$\begin{aligned} \chi_2 &= 4u^3 + 48u^5 - 56u^6 + 540u^7 - 1104u^8 + 6080u^9 - 16224u^{10} \\ &\quad + 71112u^{11} - 217568u^{12} + 854088u^{13} - 2801448u^{14} \\ &\quad + 10406696u^{15} - 35347248u^{16} + 127700184u^{17} - 441292224u^{18} \\ &\quad + 1572034848u^{19} - 5478132192u^{20} + 19376188360u^{21} \\ &\quad - 67789584000u^{22} + 238893185724u^{23} - 837314536464u^{24} \\ &\quad + 2945043944832u^{25} - 10330420720848u^{26} + 36296731651536u^{27} \\ &\quad - 127357151349024u^{28} + 447215127845208u^{29} - 1569296747965504u^{30} \\ &\quad + 5508649692892140u^{31} - 19329684711770496u^{32} + \mathcal{O}(u^{33}) \end{aligned} \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned} \chi_3 &= -8u^3 - 192u^5 + 224u^6 - 3240u^7 + 6240u^8 - 47104u^9 \\ &\quad + 120192u^{10} - 664464u^{11} + 2004192u^{12} - 9290832u^{13} \\ &\quad + 30811680u^{14} - 129122608u^{15} + 450744288u^{16} \\ &\quad - 1782476880u^{17} + 6386451616u^{18} - 24421651584u^{19} \\ &\quad + 88559516928u^{20} - 331989682608u^{21} + 1209425409216u^{22} \\ &\quad - 4478974359288u^{23} + 16330242543136u^{24} - 60004235848512u^{25} \\ &\quad + 218565081452544u^{26} - 798796179070736u^{27} \\ &\quad + 2904628977142848u^{28} - 10574154692647776u^{29} \\ &\quad + 38375163920029824u^{30} - 139281563647415688u^{31} \\ &\quad + 504485191859767776u^{32} + \mathcal{O}(u^{33}) \end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\begin{aligned} \chi_4 &= 16u^3 + 768u^5 - 896u^6 + 19440u^7 - 34368u^8 + 367616u^9 \\ &\quad - 865536u^{10} + 6292128u^{11} - 18048704u^{12} + 102500448u^{13} \\ &\quad - 333333504u^{14} + 1620902048u^{15} - 5683295808u^{16} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 25089747744 u^{17} - 91743686592 u^{18} + 381478570368 u^{19} \\
& - 1424913277056 u^{20} + 5707313840416 u^{21} - 21513390978816 u^{22} \\
& + 84135624247536 u^{23} - 317898732578880 u^{24} + 1223785613116416 u^{25} \\
& - 4618770190694016 u^{26} + 17587366457227584 u^{27} \\
& - 66193175215675584 u^{28} + 250053770186420064 u^{29} \\
& - 93788851140235520 u^{30} + 3521462977280536368 u^{31} \\
& - 13160931014669514240 u^{32} + \mathcal{O}(u^{33})
\end{aligned} \tag{A.15}$$

$$\begin{aligned}
\mu_2 = & 24 u^5 - 24 u^6 + 528 u^7 - 960 u^8 + 8496 u^9 - 21312 u^{10} + 125904 u^{11} \\
& - 380016 u^{12} + 1813416 u^{13} - 6046440 u^{14} + 25675200 u^{15} \\
& - 90096000 u^{16} + 358481304 u^{17} - 1289158128 u^{18} \\
& + 4943015520 u^{19} - 17962279824 u^{20} + 67392548664 u^{21} \\
& - 245727603504 u^{22} + 909266080080 u^{23} - 3320815050576 u^{24} \\
& + 12128960912304 u^{25} - 44610240576576 u^{26} + 160166658293184 u^{27} \\
& - 594693173197056 u^{28} + 2121974623116264 u^{29} + \mathcal{O}(u^{30})
\end{aligned} \tag{A.16}$$

Hieraus erhält man nun wiederum die Reihen der feldtheoretischen Größen:

$$\begin{aligned}
\tilde{Z}_R = & 4 u + 4 u^2 + 12 u^3 - 28 u^4 + 108 u^5 - 212 u^6 + 516 u^7 - 1644 u^8 \\
& + 5532 u^9 - 17140 u^{10} + 51828 u^{11} - 164036 u^{12} + 546064 u^{13} \\
& - 1816444 u^{14} + 6011296 u^{15} - 19871236 u^{16} + 66232052 u^{17} \\
& - 215895348 u^{18} + 816448516 u^{19} - 1606659484 u^{20} + 15876999136 u^{21} \\
& + 23576858612 u^{22} + 309134972368 u^{23} + 461732866396 u^{24} \\
& + 622772527620 u^{25} + \mathcal{O}(u^{26})
\end{aligned} \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
m_R = & u^{-1} + \frac{1}{2} - \frac{37 u}{8} - \frac{3 u^2}{16} - \frac{461 u^3}{128} + \frac{3055 u^4}{256} - \frac{93841 u^5}{1024} + \frac{459445 u^6}{2048} \\
& - \frac{17129789 u^7}{32768} + \frac{67517915 u^8}{65536} - \frac{859984139 u^9}{262144} + \frac{5490460315 u^{10}}{524288} \\
& - \frac{141990299721 u^{11}}{4194304} + \frac{858750947131 u^{12}}{8388608} - \frac{10904160034025 u^{13}}{33554432} \\
& + \frac{69160179899429 u^{14}}{67108864} - \frac{7116276303965597 u^{15}}{2147483648} + \frac{48405343897843987 u^{16}}{4294967296} \\
& - \frac{434643602855200935 u^{17}}{17179869184} + \frac{7285756333484924671 u^{18}}{34359738368} \\
& + \frac{127309297863244954237 u^{19}}{274877906944} + \frac{3592525838456579288657 u^{20}}{549755813888} \\
& + \frac{31542912575258944557593 u^{21}}{2199023255552} + \frac{276857572382740575217331 u^{22}}{4398046511104} \\
& - \frac{18653887322542666152108761 u^{23}}{70368744177664} + \mathcal{O}(u^{24})
\end{aligned} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{g}_R = & \frac{12}{u} + 24 - 60 u - 168 u^2 + 120 u^3 + 744 u^4 - 2952 u^5 + 2088 u^6 \\
& + 2028 u^7 + 8880 u^8 - 84228 u^9 + 199224 u^{10} - 197856 u^{11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 202848 u^{12} - 1849248 u^{13} + 8199240 u^{14} - 22439268 u^{15} \\
& + 89046456 u^{16} + 297425916 u^{17} + 6101707704 u^{18} \\
& + 44053224132 u^{19} + 315271252608 u^{20} + 1169357190372 u^{21} \\
& + 3313064616984 u^{22} - 9403907343084 u^{23} + \mathcal{O}(u^{24})
\end{aligned} \tag{A.19}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_R = & 12 + 18 u - \frac{27 u^2}{2} - \frac{303 u^3}{4} + \frac{4545 u^4}{32} + \frac{15471 u^5}{64} - \frac{408039 u^6}{256} \\
& + \frac{1472193 u^7}{512} - \frac{35412327 u^8}{8192} + \frac{267883779 u^9}{16384} - \frac{5027089797 u^{10}}{65536} \\
& + \frac{31424128119 u^{11}}{131072} - \frac{622725036483 u^{12}}{1048576} + \frac{3312664681995 u^{13}}{2097152} \\
& - \frac{42584673435327 u^{14}}{8388608} + \frac{284037378575649 u^{15}}{16777216} \\
& - \frac{28656055247492151 u^{16}}{536870912} + \frac{205631388063280971 u^{17}}{1073741824} \\
& - \frac{803532217797562425 u^{18}}{4294967296} + \frac{49636718943241346235 u^{19}}{8589934592} \\
& + \frac{1961317488664428444207 u^{20}}{68719476736} + \frac{34593557443412150136753 u^{21}}{137438953472} \\
& + \frac{481427652747835003257855 u^{22}}{549755813888} + \frac{3586238693121147130188711 u^{23}}{1099511627776} \\
& - \frac{80855641950619096883021403 u^{24}}{17592186044416} + \mathcal{O}(u^{25})
\end{aligned} \tag{A.20}$$

$$\begin{aligned}
g_R^{(4)} = & \frac{2}{u^7} + \frac{4}{u^6} - \frac{22}{u^5} - \frac{46}{u^4} + \frac{92}{u^3} + \frac{214}{u^2} - \frac{708}{u} + 2130 - 6820 u - 6486 u^2 \\
& + 134100 u^3 - 378688 u^4 + 104812 u^5 + 2066332 u^6 \\
& - 5834148 u^7 + 4179752 u^8 + 12392238 u^9 - 31879524 u^{10} \\
& + 121904630 u^{11} + 883845966 u^{12} + 7117537234 u^{13} \\
& + 46346143570 u^{14} + 154930655258 u^{15} + 254270180562 u^{16} \\
& - 2581103331800 u^{17} + \mathcal{O}(u^{18})
\end{aligned} \tag{A.21}$$

$$\begin{aligned}
u_R^{(4)} = & \frac{2}{u^6} + \frac{3}{u^5} - \frac{57}{4 u^4} - \frac{197}{8 u^3} + \frac{2955}{64 u^2} + \frac{7845}{128 u} - \frac{221981}{512} + \frac{2607627 u}{1024} \\
& - \frac{173018253 u^2}{16384} + \frac{347606273 u^3}{32768} + \frac{10999082265 u^4}{131072} - \frac{97846465827 u^5}{262144} \\
& + \frac{1255534886431 u^6}{2097152} + \frac{2101390940121 u^7}{4194304} - \frac{80012803276197 u^8}{16777216} \\
& + \frac{369889826503211 u^9}{33554432} - \frac{11146612424809533 u^{10}}{1073741824} - \frac{30534938811050727 u^{11}}{2147483648} \\
& + \frac{1366993123335246941 u^{12}}{8589934592} + \frac{7599286309023745737 u^{13}}{17179869184} \\
& + \frac{750196256047529028933 u^{14}}{137438953472} + \frac{9819768215978551082683 u^{15}}{274877906944}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{132872846909364027004197 u^{16}}{1099511627776} + \frac{661127238289407960340077 u^{17}}{219902325552} \\
& - \frac{52738318130160538311422985 u^{18}}{35184372088832} + \mathcal{O}(u^{19})
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Energie:

$$\begin{aligned}
\langle s(x)s(x+\hat{\mu}) \rangle = & 12 u^3 + 60 u^5 - 84 u^6 + 420 u^7 - 1056 u^8 + 3756 u^9 \\
& - 11220 u^{10} + 37356 u^{11} - 118164 u^{12} + 389220 u^{13} \\
& - 1261932 u^{14} + 4163592 u^{15} - 13680288 u^{16} \\
& + 45339000 u^{17} - 150244860 u^{18} + 500333916 u^{19} \\
& - 1668189060 u^{20} + 5579763432 u^{21} - 18692075820 u^{22} \\
& + 62762602860 u^{23} - 211062133044 u^{24} + 711052107060 u^{25} \\
& - 2398859016684 u^{26} + 8104930537260 u^{27} \\
& - 27418371970332 u^{28} + 92870374818636 u^{29} \\
& - 314919021836664 u^{30} + 1069031176668444 u^{31} \\
& - 3632563729018272 u^{32} + \mathcal{O}(u^{33})
\end{aligned} \tag{A.23}$$

Danksagungen

An dieser Stelle möchte ich mich bei Herrn Professor Gernot Münster für die interessante Aufgabenstellung und die angenehme Betreuung bedanken.

Außerdem danke ich den Mitgliedern der Arbeitsgruppe, die immer wieder zu Diskussionen bereit waren. Hier seien stellvertretend Klaus Pinn, Jochen Heitger und York Xylander erwähnt.

Weiterhin bin ich Herrn Norbert Siepmann für die sprachliche Korrektur der Arbeit zu großem Dank verpflichtet.

Schließlich bedanke ich mich bei meinen Eltern, die mir dieses Studium ermöglichten.

Hiermit versichere ich, die Arbeit selbstständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel benutzt zu haben.