

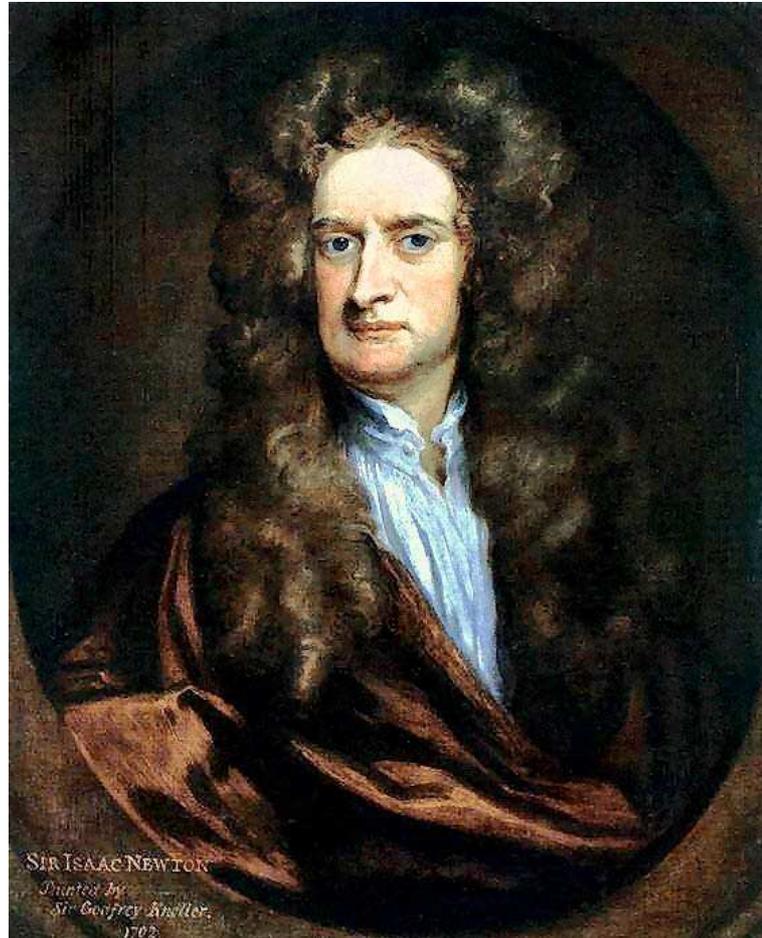
Spektralfunktionen im dreidimensionalen $O(4)$ -Spinmodell

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
an der Fakultät für Physik
der Universität Bielefeld

vorgelegt von
Oliver Vogt

März 2007



*Was wir wissen ist ein Tropfen,
was wir nicht wissen ein Ozean.*

Sir Isaac Newton (1643-1727)

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	9
1 Das dreidimensionale $O(4)$-Spinmodell	15
1.1 $O(N)$ -Spinmodelle mit äußerem Feld	15
1.2 Kritisches Verhalten	21
1.2.1 Kritische Exponenten	21
1.2.2 Corrections to Scaling	24
1.3 Der Goldstone-Effekt	25
1.4 Zusammenhang zwischen $O(4)$ und QCD	28
2 Spektrale Darstellung der Korrelationsfunktionen	33
2.1 Korrelationsfunktionen im Kontinuum	33
2.2 Zweiebenen-Korrelationsfunktionen auf dem Gitter	38
2.3 Die Spektralfunktion	39
2.4 Das Default-Modell	42
2.4.1 Bestimmung der Kontinuumsversion	42
2.4.2 Übertragung auf das Gitter	46
2.5 Zusammenhang zwischen den Korrelationsfunktionen auf dem Gitter	48

3	Numerische Methoden	51
3.1	Die Maximum Entropie Methode	51
3.1.1	Bayes' Theorem und die Prinzipien von MEM	52
3.1.2	Kurzbeschreibung der MEM-Prozedur	54
3.1.3	MEM-Fehlerbetrachtung	57
3.2	Monte-Carlo-Simulation	58
3.3	Der Wolff-Cluster-Algorithmus	60
3.4	Die Jackknife-Fehleranalyse	62
4	Resultate und Auswertung	65
4.1	Messmethode und verwendete Parameter	65
4.2	Verhalten des Ordnungsparameters M	67
4.3	Das transversale Spektrum	71
4.3.1	Spektralfunktionen im transversalen Kanal	71
4.3.2	Korrelationsfunktion und transversale Masse	76
4.3.3	Bestimmung der Stiffness c_s	79
4.3.4	Skalenfunktion der transversalen Korrelationslänge	81
4.4	Das longitudinale Spektrum	83
4.4.1	Spektralfunktionen im longitudinalen Kanal	83
4.4.2	Vergleich von transversalem und longitudinalem Spektrum	86
4.4.3	Beziehung zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion	95
4.4.4	Skalenfunktion der longitudinalen Korrelationslänge	104

Zusammenfassung	107
A Tabellen	109
A.1 Messwerte für die Magnetisierung M	109
A.2 Messwerte für die Suszeptibilitäten	112
A.3 Transversale und longitudinale Spektraldaten	115
A.4 Fit-Resultate für die transversale Masse	118
Literaturverzeichnis	119

Einleitung

Die Teilchenphysik befasst sich mit der Suche nach den fundamentalen Bestandteilen der Materie und ihren Wechselwirkungen. Grundlage für die Beschreibung von Elementarteilchen und Kräften, die zwischen diesen kleinsten Bausteinen der Materie wirken, bildet die *Quantenfeldtheorie*. Die Antwort auf die Frage, welche Teilchen als fundamental angesehen werden können, war in den letzten hundert Jahren einem ständigen Wechsel unterworfen, welcher mit der Entwicklung immer besserer und genauerer experimenteller Methoden einherging. Grundlegende Arbeiten zur Entwicklung der Quantenfeldtheorie lieferte Paul Dirac in den zwanziger Jahren des letzten Jahrhunderts. So führte die relativistische Beschreibung des freien Elektrons durch die *Dirac-Gleichung* zu der Erkenntnis, dass das Elektron neben seiner Ladung $q_e = -e$ einen inneren Freiheitsgrad besitzt. Dieser Freiheitsgrad, der Spin, kann zwei mögliche Werte mit $s = \pm 1/2$ einnehmen. Des Weiteren konnte die Existenz eines Antiteilchens zum Elektron, das Positron, vorhergesagt werden. Es besitzt die gleichen Eigenschaften wie das Elektron, hat aber die entgegengesetzte elektrische Ladung.

Die Kopplung des Elektrons an ein elektromagnetisches Feld, welches das Photon beschreibt, führte zur ersten Quantenfeldtheorie, der *Quantenelektrodynamik* (QED). Die grundlegende Forderung an die Theorie nach Invarianz unter lokalen Eichtransformationen ist das Fundament der QED und aller später entwickelten Quantenfeldtheorien. Hierbei spielen Symmetrien eine essentielle Rolle. Die Symmetriegruppe der QED ist die $U(1)$. Durch die spätere Messung des Spins und des magnetischen Moments des Elektrons konnte die QED experimentell bestätigt werden. Somit war der Weg frei zur Entwicklung weiterer Quantenfeldtheorien. Das *Standardmodell* beschreibt die Phänomene der Teilchenphysik durch Eigenschaften einer verhältnismäßig geringen Anzahl von Teilchen. Es hat bis heute allen experimentellen Überprüfungen standgehalten, wobei jedoch auch klar ist, dass diese Theorie nicht vollständig ist. Durch die Inbetriebnahme des neuen Teilchenbeschleunigers *LHC* am CERN in Genf im Jahre 2007 erhofft man sich experimentelle Hinweise auf nötige Erweiterungen des Standardmodells.

Nach heutigem Wissen kann man sämtliche Dynamik in der Physik auf vier funda-

mentale Wechselwirkungen, der Gravitation, dem Elektromagnetismus, die schwache und die starke Wechselwirkung, zurückführen. Die Elementarteilchen sind auf der einen Seite die *Leptonen* und *Quarks*, welche Spin- $\frac{1}{2}$ Fermionen sind, und auf der anderen Seite ein Satz von Spin-1 Bosonen, die sogenannten *Eichbosonen*, die in der Theorie als Träger der Wechselwirkungskräfte dienen. Die Gravitation, die durch die Allgemeine Relativitätstheorie beschrieben wird, hat wegen ihrer geringen Wechselwirkungsstärke keinen Einfluss auf die Elementarteilchenphysik. Die schwache Wechselwirkung beschreibt Zerfallsprozesse, wie etwa den β -Zerfall des Neutrons. Weinberg und Salam versuchten, die elektromagnetische und die schwache Wechselwirkung zu verknüpfen. Die Stärke dieses Modells beruht auf der enorm präzisen Vorhersage von störungstheoretischen Berechnungen im elektroschwachen Bereich für experimentelle Befunde aus Streuexperimenten, die in den letzten Jahrzehnten in immer höheren Energiebereichen und mit wachsender Genauigkeit durchgeführt werden.

Die *Quantenchromodynamik* (QCD) beschäftigt sich als fundamentale Theorie mit der starken Wechselwirkung der elementaren Bausteine der Materie. Dabei erfüllt sie die von Richard Feynmann formulierten Kriterien einer „guten Theorie“; sie ist einfach und nicht offensichtlich falsch. Die Physiker Gell-Mann und Zweig entwickelten im Jahre 1963 ein Modell, welches das gesamte Spektrum stark wechselwirkender Teilchen beschreibt. Sie führten hierzu einen neuen Typ von Elementarteilchen ein, die bereits erwähnten *Quarks*. Während Gell-Mann und Zweig drei Arten von Quarks voraussagten, geht man in der heutigen wissenschaftlichen Betrachtung von der Existenz sechs verschiedener Quarks aus (*up*(u), *down*(d), *strange*(s), *charm*(c), *bottom*(b) und *top*(t)). Zum Erreichen ganzzahliger Ladungen für Baryonen sind für die Quarks folgende elektrische Ladungen eingeführt worden: $+2/3$ für u, c, t und $-1/3$ für d, s, b . Mit diesen sechs Arten von Quarks, auch als *flavours* bezeichnet, lassen sich sämtliche bekannten *Mesonen* (Quark-Antiquark-Paar) und *Baryonen* (drei Quarks) beschreiben. So sind beispielsweise das Proton als gebundener Zustand von uud und das Neutron als udd beschreibbar. Die Kraft zwischen den Quarks wird durch die *Gluonen*, den Eichbosonen der Quantenchromodynamik, vermittelt. In der Beschreibung der Stärke von Übergängen zwischen verschiedenen Hadronen und vor allem bei der Vorhersage von neuen Hadronen hatte das entwickelte Quark-Modell großen Erfolg.

Die Quarks selbst besitzen noch einen weiteren, inneren Freiheitsgrad, die Farbladung (*color*). Dieser wurde von Gell-Mann, Greenberg, Han und Nambu postuliert, um das Spin-Statistik-Problem zu beheben. Die QCD basiert ebenso auf dem Grundprinzip der lokalen Eichinvarianz, wobei die Symmetrie hier durch die Farbladungsgruppe $SU(3)$ gegeben ist. Ein besonders wichtiger und wesentlicher Unterschied zur QED besteht aber darin, dass diese Symmetriegruppe eine nicht-abelsche Gruppe ist, d.h. die Elemente dieser Gruppe kommutieren nicht miteinander. Aus diesem Grunde treten auch Wechselwirkungen zwischen den Eichbosonen, den Gluonen auf,

die ebenfalls eine Farbladung tragen. Als Folge dieser Wechselwirkung der Gluonen untereinander lassen sich grundlegende Eigenschaften der QCD bereits in der reinen Eichtheorie untersuchen. Hierbei wird die Dynamik der Quarks vernachlässigt, sie werden als statisch betrachtet (*quenched approximation*). Es wird lediglich der gluonische Sektor der Theorie untersucht. Dieser nicht-abelsche Charakter der Theorie ist es auch, der zusammen mit einer kleinen Anzahl Flavour zu der wichtigen Eigenschaft der *asymptotischen Freiheit* führt. Bei kleinen Abständen, d. h. großen Impulsüberträgen bzw. hohen Temperaturen, wechselwirken die Farbladungsträger kaum. Die Quarks verhalten sich wie freie Teilchen, was als asymptotische Freiheit bezeichnet wird. Experimentell wurde dies durch tief-inelastische Elektron-Proton-Stöße verifiziert. In den siebziger Jahren wurde von den Physikern t'Hooft, Politzer, Gross und Wilczek gezeigt, dass nur nicht-abelsche Eichtheorien diese Eigenschaft besitzen können.

In der Natur wurden bisher keine freien Quarks, sondern nur farbneutrale Teilchen gefunden. Dies führte zur Aufstellung der *Confinement*-Hypothese. Diese besagt, dass die Energie, die notwendig ist, um zwei Quarks voneinander zu trennen, mit dem Abstand dieser Quarks zueinander ansteigt. Für die Separation zweier Quarks wäre somit eine unendliche Energiemenge nötig. Hierin liegt ein wesentlicher Grund für die Nichtanwendbarkeit der Störungstheorie zur Beschreibung der QCD für große Abstände, da das Confinement eine langreichweitige Eigenschaft darstellt. Nicht-störungstheoretische Ansätze sind hierfür nötig. Dies gilt ebenso für die Untersuchung einer weiteren Eigenschaft der QCD, dass es für genügend hohe Temperaturen zu einem Phasenübergang von der Confinementphase zu einem *Quark-Gluon-Plasma* (QGP) kommt. Unterhalb einer *kritischen Temperatur* T_c sind die Quarks in ihren Bindungszuständen eingesperrt, weswegen man auch von Confinement spricht. Oberhalb von T_c bilden sie zusammen mit den Gluonen ein Plasma, in dem die Quarks auch außerhalb von Bindungszuständen vorkommen können. Man sagt auch, dass sich die Teilchen in der *Deconfinement-Phase* befinden. Man geht beim derzeitigen Wissensstand davon aus, daß kurz nach dem Urknall zunächst ein Quark-Gluon-Plasma existierte, in dem sich Quarks und Gluonen quasifrei bewegen konnten. Mit zunehmender Expansion bzw. Abkühlung kam es dann ca. $10^{-6}s$ nach dem Urknall zu einem *Phasenübergang*, und die Materie hadronisierte [1].

Phasenübergänge treten in vielen unterschiedlichen Teilgebieten der Physik auf. Aus einer kleinen Änderung eines Parameters resultiert dabei eine gravierende Veränderung der makroskopischen Eigenschaften der Materie. Das wohl bekannteste Beispiel eines Phasenübergangs ist die Änderung des Aggregatzustandes von flüssig zu gasförmig bei der Erwärmung von Wasser. Aber auch in der Elementarteilchenphysik spielen Phasenübergänge eine wichtige Rolle. Dabei ist die Untersuchung des Übergangs von der Hochtemperatur- zur Tieftemperaturphase in der QCD von großem Interesse. Es gibt mittlerweile Versuche an großen Teilchenbeschleunigern, durch Schwerionenstöße bei hohen Energien ein freies QGP zu erzeugen, das dann

abkühlt und den Deconfinement-Confinement-Übergang durchläuft. Außerdem kann auch mit Hilfe der Gittereichtheorie der Übergang simuliert werden, doch die Simulationen sind selbst auf großen Parallelcomputern sehr zeitintensiv.

Aus der Betrachtung spezieller Grenzfälle, die so in der Natur nicht exakt realisiert sind, lassen sich bereits viele Erkenntnisse über die volle Theorie gewinnen. Im Grenzfall unendlich großer Quarkmassen beispielsweise, der sogenannten *Valenzquark-Approximation*, ist die relevante Symmetrie, die gebrochen wird, eine globale $Z(3)$ -Symmetrie, die aus der lokalen $SU(N_c)$ -Colour-Symmetrie mit $N_c = 3$ Farbladungen resultiert. Im Grenzfall verschwindender Quarkmassen dagegen besitzt die Lagrangedichte für N_f Flavours eine chirale $SU_R(N_f) \times SU_L(N_f) \times U_{R+L}(1)$ -Symmetrie. Am Übergangspunkt wird diese spontan zu einer $SU_{R+L}(N_f) \times U_{R+L}(1)$ -Symmetrie gebrochen, wodurch in der hadronischen Phase das sogenannte chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ von Null verschieden ist.

Der chirale Phasenübergang für den Fall $N_f = 2$ ist besonders interessant, da die *up*- und *down*-Quarks im Vergleich zu den übrigen Quarks eine sehr geringe Masse haben. Sie spielen für die Thermodynamik eine besondere Rolle, denn der Einfluss der schwereren Quarks wird exponentiell mit deren Masse stark unterdrückt. Durch die Untersuchung des *O(4)-symmetrischen Spinmodells*, das einen Phasenübergang zweiter Ordnung hat, können auch Aussagen über das kritische Verhalten der QCD mit zwei masselosen Quarkflavours in der Nähe des chiralen Phasenübergangs getroffen werden. Eine Begründung hierfür liefert die *Renormierungsgruppentheorie*, mit der unterschiedliche physikalische Systeme mit gleichem kritischem Verhalten in einer sogenannten Universalitätsklasse zusammengefaßt werden können. Systeme in derselben Klasse haben die gleichen kritischen Exponenten und gleiche universelle Amplitudenverhältnisse. Bisherige Untersuchungen haben gezeigt, daß die QCD in $3+1$ Dimensionen für zwei masselose Quarkflavours in derselben Universalitätsklasse wie das dreidimensionale $O(4)$ -symmetrische Spinmodell liegt [2, 3].

Dies ist aber nur eine Motivation, das $O(4)$ -Spinmodell genauer zu untersuchen. Es ist als Spinmodell an sich bereits eine genauere Betrachtung wert, da die hier gewonnenen Resultate auch für andere physikalische Modelle interessant sind. Aus numerischen Untersuchungen zum Verhalten einiger Observablen, wie z. B. der Magnetisierung oder der Suszeptibilität, existieren bereits numerische Ergebnisse für die kritischen Exponenten dieses Modells [4, 5]. Mit Hilfe weiterer Untersuchungen zu den Korrelationslängen, die für den exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktionen der longitudinalen und transversalen Spinkomponenten verantwortlich sind, konnte der Verlauf der zugehörigen Skalenfunktionen g_ξ^T und g_ξ^L bestimmt werden [6]. Hierbei konnten lediglich Erkenntnisse über den mit den Korrelationslängen assoziierten niedrigsten energetischen Zustand in den Korrelationsfunktionen gewonnen werden. Höhere, angeregte Zustände waren durch diese Untersuchungen nicht zugänglich, da hierzu eine komplette spektrale Darstellung der Korrelationsfunk-

tionen notwendig gewesen wäre. Alternative Untersuchungen mittels der Maximum Entropie Methode (MEM) zur Extraktion der Spektralfunktionen aus den longitudinalen und transversalen Korrelationsfunktionen waren aber auf Grund zu kleiner Gitter und unzureichender Statistik nicht befriedigend [7].

Das Ziel dieser Arbeit ist es, den in [7] gewählten richtigen Ansatz zur Bestimmung der Spektralfunktionen des dreidimensionalen $O(4)$ -Spinmodells aus den Korrelationsfunktionen auf einem erheblich größeren Gitter mit deutlich verbesserter Statistik zu aussagekräftigen Resultaten zu führen. Die Frage nach der Form der Spektralfunktionen soll zum einen die Auflösung möglicher angeregter Zustände in den Korrelationen ermöglichen und auf der anderen Seite den Nachweis erbringen, dass das Spektrum des transversalen Kanals entgegen neuerer Behauptungen [8, 9] ein Gaußsches Modell darstellt, also dem Spektrum der freien Theorie entspricht. Diese Arbeit beschäftigt sich zudem genauer mit der durch Patashinskii und Pokrovskii in [10, 11] zwar hergeleiteten, aber erst bei Fisher und Privman [12] angegebenen Relation zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion und versucht, deren Gültigkeitsbereich durch separate Untersuchungen für $T < T_c$, $T = T_c$ und $T > T_c$ zu ermitteln. Des Weiteren wird das Verhalten der Korrelationslängen, die aus den jeweiligen niedrigsten Niveaus der Spektraldaten gewonnen werden, zur Bestimmung der entsprechenden Skalenfunktion mit dem Ziel untersucht, die auf dem größeren Gitter und mit höherer Statistik gewonnen Ergebnisse mit denen aus [6, 13] vergleichen zu können und für den Bereich der longitudinalen Korrelationslänge bei $T < T_c$ eine Skalenfunktion zu finden.

Diese Arbeit besitzt die nun folgende Struktur. Im ersten Kapitel werden zunächst $O(N)$ -Modelle bei Anwesenheit eines äußeren Feldes H mit ihren relevanten Parametern und Observablen vorgestellt. Danach werden im Rahmen der Betrachtung des kritischen Verhaltens die Einführung der kritischen Exponenten vorgenommen. Dabei wird ebenso auf universelle Skalenfunktionen eingegangen. Außerdem wird als zentraler Punkt der sogenannte Goldstone-Effekt, der zu einem bestimmten Verhalten des Ordnungsparameters in der gebrochenen Phase für kleine Felder führt, beschrieben und auf den Zusammenhang des $O(4)$ -Modells mit der QCD eingegangen.

Kapitel 2 beschäftigt sich mit den theoretischen Vorhersagen zur spektralen Darstellung der Korrelationsfunktionen. Zunächst werden die Beziehungen zwischen der transversalen und der longitudinalen Korrelationsfunktion analytisch gezeigt, bevor eine Definition der eigentlichen Spektralfunktion erfolgt. Im Anschluss werden theoretische Vorhersagen zu den Spektralfunktionen zur Bestimmung des im Rahmen der Analyse notwendigen *Default-Modells* diskutiert.

Danach werden die verwendeten Simulationsmethoden und die zur Auswertung der Daten benötigten Verfahren im dritten Kapitel vorgestellt. Besonderes Augen-

merk wird dabei auf die Beschreibung der verwendeten Maximum Entropie Methode (MEM) gelegt.

Im letzten Kapitel geht es um die Analyse der gewonnenen Daten. Nach einer kurzen Übersicht zu den verwendeten Parametern erfolgen zunächst Untersuchungen zum Verhalten des Ordnungsparameters. Im Anschluss werden die Ergebnisse für die Spektralfunktionen im transversalen Kanal vorgestellt und deren Verhalten am kritischen Punkt, in der gebrochenen und der symmetrischen Phase in Abhängigkeit von Magnetfeld H und Kopplung J untersucht und mit bisherigen Ergebnissen verglichen. Zum Abschluss soll eine Vorstellung der MEM-Ergebnisse für den longitudinalen Kanal wiederum am kritischen Punkt, in der gebrochenen und der symmetrischen Phase erfolgen.

Kapitel 1

Das dreidimensionale O(4)-Spinmodell

1.1 O(N)-Spinmodelle mit äußerem Feld

Wir betrachten zunächst ein d -dimensionales kubisches Gitter des Volumens V mit periodischen Randbedingungen. Jeder Gitterplatz i sei mit einem N -komponentigen Einheitsvektor, der im folgenden mit Spin \mathbf{s}_i bezeichnet wird, besetzt. Da die einzelnen Spins jeweils auf die Länge $|\mathbf{s}_i| = 1$ beschränkt sind, spricht man auch vom sogenannten nicht-linearen σ -Modell. Die Richtung der Spins im N -dimensionalen Raum ist jedoch beliebig. Abbildung 1.1 zeigt beispielhaft eine Spinverteilung des zweidimensionalen O(2)-Modells. Im Falle von $N = 1$ erhält man das Ising-Modell.

Zwischen den einzelnen Spins dieses Systems besteht eine gegenseitige Wechselwirkung, die jedoch invariant unter Drehungen im N -dimensionalen Raum ist. Die Wirkung dieses Modells ist definiert durch

$$\beta\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \mathbf{H} \cdot \sum_i \mathbf{s}_i, \quad (1.1)$$

wobei \mathbf{H} ein äußeres Feld darstellt, das die Richtung der Spins explizit beeinflusst. J bezeichnet die Kopplung zwischen den Spins und β die inverse Temperatur des Systems. Die erste Summe in Gleichung (1.1) wird nur über nächste Nachbarn ($\langle i, j \rangle$) auf dem Gitter ausgeführt. Durch die Einführung von $H \neq 0$ wird die O(N)-Symmetrie explizit gebrochen, da $\mathbf{H} \cdot \mathbf{s}$ bei fixem H nicht mehr O(N)-invariant ist.

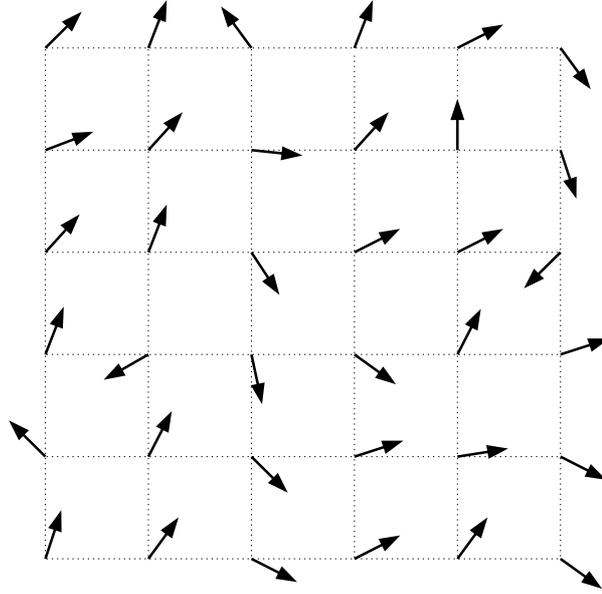


Abbildung 1.1: Spinverteilung des zweidimensionalen $O(2)$ -Modells für $N=d$ [13].

Da $J = \beta j$ mit $j > 0, \text{const.}$ gilt, kann die Kopplung auch als inverse Temperatur betrachtet werden. Wegen $J > 0$ werden sich benachbarte Spins parallel auszurichten. Gleichzeitig ist es für das Gesamtsystem energetisch günstiger, wenn sich alle Spins in Richtung des äußeren Feldes \mathbf{H} ausrichten. Je größer J , oder gleichbedeutend je kleiner die Temperatur T , desto größer ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß zwei benachbarte Spins gleich ausgerichtet sind. Dies hat zur Folge, daß für $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ unterhalb einer kritischen Temperatur T_c die $O(N)$ -Symmetrie spontan gebrochen wird. Bei Anwesenheit des äußeren Feldes \mathbf{H} ist die ursprüngliche Symmetrie explizit gebrochen, weil die Spins bevorzugt in Richtung \mathbf{H} auftreten. Mit der Wirkung (1.1) lässt sich die kanonische Zustandssumme des Systems durch

$$Z = \int \mathcal{D}\Sigma e^{-\beta\mathcal{H}(\Sigma)} \quad (1.2)$$

berechnen, wobei über alle möglichen Zustände Σ des Systems integriert wird. Für diese Arbeit sind zahlreiche Definitionen und Observablen relevant, auf die jetzt eingegangen werden soll. Der Erwartungswerte einer beliebigen Observablen \mathcal{O} kann stets mit Hilfe der Zustandssumme definiert werden. Es gilt allgemein

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\Sigma \mathcal{O}(\Sigma) e^{-\beta\mathcal{H}(\Sigma)}. \quad (1.3)$$

Mit der in Gleichung (1.2) eingeführten Zustandssumme lässt sich die freie Energie $F(T, H, V)$ des Systems über die Beziehung

$$F = -T \log(Z) \quad (1.4)$$

sowie die freie mit T normierte Energiedichte $f(T, H, V)$ gemäß

$$f = \frac{F}{VT} = -\frac{1}{V} \log Z \quad (1.5)$$

definieren. Die freie Energiedichte f enthält einen sigulären Anteil $f_s(T, H, V)$, der für das kritische Verhalten im Grenzfall $V \rightarrow \infty$ verantwortlich ist, und einen regulären Anteil $f_r(T, V)$. Sie kann in diese Anteile nach

$$f = f_s(T, H, V) + f_r(T, H, V). \quad (1.6)$$

zerlegt werden. Eine weitere wichtige thermodynamische Größe des Systems ist die Magnetisierung $\mathbf{M}(T, H)$, die durch die Ableitung der freien Energiedichte nach dem äußeren Feld

$$\mathbf{M} = - \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{H}} \right)_T \quad (1.7)$$

gewonnen werden kann. Mit der Wirkung aus Gleichung (1.1) ergibt sich schließlich

$$\mathbf{M} = \langle \mathbf{s} \rangle, \quad (1.8)$$

wobei

$$\mathbf{s} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{s}_i \quad (1.9)$$

für das Mittel des Spins über das Gitter steht. Wichtig für die Untersuchung der O(N)-Modelle ist darüber hinaus die Suszeptibilität χ als Indikator für ungewöhnliches Verhalten des Ordnungsparameters $M = |\mathbf{M}|$. Die zweifache Ableitung der freien Energiedichte nach dem äußeren Feld \mathbf{H} liefert die Suszeptibilitätsmatrix

$$\chi_{ab} = -\frac{\partial^2 f}{\partial H_a \partial H_b} = \frac{\partial M_a}{\partial H_b} = \frac{\partial \langle s_a \rangle}{\partial H_b}. \quad (1.10)$$

mit $a, b = 1, \dots, N$ und

$$M_a = -\frac{\partial f}{\partial H_a} = \langle s_a \rangle. \quad (1.11)$$

Mit den Gleichungen (1.3) und (1.1) folgt hieraus

$$\begin{aligned} \chi_{ab} &= \frac{\partial \langle s_a \rangle}{\partial H_b} \\ &= \frac{\partial}{\partial H_b} \left(\frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\Sigma s_a \cdot e^{-\beta\mathcal{H}} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\Sigma s_a V_{s_b} \cdot e^{-\beta\mathcal{H}} \\ &\quad - \frac{1}{Z^2} \left(\int \mathcal{D}\Sigma s_a \cdot e^{-\beta\mathcal{H}} \right) \left(\int \mathcal{D}\Sigma V_{s_b} \cdot e^{-\beta\mathcal{H}} \right) \\ &= V (\langle s_a s_b \rangle - \langle s_a \rangle \langle s_b \rangle). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Für die gesamte Suszeptibilität ergibt sich somit folgende Beziehung

$$\chi_{tot} = \text{Tr } \chi = \sum_a \chi_{aa} = V (\langle \mathbf{s}^2 \rangle - \langle \mathbf{s} \rangle^2). \quad (1.13)$$

Gilt für die innere Dimension des Modells $N > 1$, so ist es sinnvoll, die einzelnen Spinvektoren in jeweils eine parallele (longitudinale) und senkrechte (transversale) Komponente zu $\mathbf{H} = H\mathbf{n}$ mit $\mathbf{n}^2 = 1$ nach

$$\mathbf{s}_i = s_i^{\parallel} \mathbf{n} + \mathbf{s}_i^{\perp} \quad (1.14)$$

zu zerlegen, da durch die Anwesenheit des äußeren Feldes \mathbf{H} eine Richtung besonders ausgezeichnet und die $O(N)$ -Symmetrie damit explizit gebrochen wird. Aus diesem Grunde richtet sich die Magnetisierung \mathbf{M} parallel zum äußeren Feld \mathbf{H} aus. Dies hat unmittelbar zur Folge, dass der Erwartungswert des transversalen Anteils der Magnetisierung verschwindet

$$\mathbf{M}^{\perp} = \left\langle \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{s}_i^{\perp} \right\rangle = \langle \mathbf{s}^{\perp} \rangle = 0, \quad (1.15)$$

und der longitudinale Anteil der Magnetisierung den Ordnungsparameter des von uns betrachteten Systems darstellt. Im folgenden wird dieser als die Magnetisierung M des Systems parallel zum angelegten Feld \mathbf{H} bezeichnet

$$M = - \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right)_T = \left\langle \frac{1}{V} \sum_i s_i^{\parallel} \right\rangle = \langle s^{\parallel} \rangle. \quad (1.16)$$

Im Falle von $H = 0$ verschwindet der Erwartungswert von M am kritischen Punkt T_c des Phasenübergangs vollständig.

Die Zerlegung der Spinvektoren in einen longitudinalen und einen transversalen Anteil hat unmittelbare Auswirkungen auf die anderen Observablen des Systems. Zunächst können zwei unterschiedliche Suszeptibilitäten χ_L und χ_T definiert werden. Die symmetrische Suszeptibilitätsmatrix (1.10) lässt sich mit Hilfe der einzelnen Komponenten des Richtungsvektors des äußeren Feldes \mathbf{H} schreiben als

$$\chi_{ab} = \chi_L n_a n_b + \chi_T (\delta_{ab} - n_a n_b) \quad \text{und} \quad (1.17)$$

$$\chi_{ab}^{-1} = \frac{1}{\chi_L} n_a n_b + \frac{1}{\chi_T} (\delta_{ab} - n_a n_b), \quad (1.18)$$

woraus sofort für die totale Suszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi_{tot} &= \sum_a \chi_{aa} \\ &= \chi_L \mathbf{n}^2 + \chi_T (N - \mathbf{n}^2) \\ &= \chi_L + \chi_T (N - 1). \end{aligned} \quad (1.19)$$

gefolgt werden kann. Die longitudinale Suszeptibilität erhält man über die Beziehung

$$\chi_L = \mathbf{n}\chi\mathbf{n} = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = V \left(\langle s_{\parallel}^2 \rangle - M^2 \right) \quad (1.20)$$

und andererseits die transversale durch

$$\chi_T = \frac{1}{N-1} (\chi_{tot} - \chi_L) = V \frac{1}{N-1} \langle \mathbf{s}^{\perp 2} \rangle. \quad (1.21)$$

χ_T beschreibt dabei die Fluktuationen des Erwartungswertes einer transversalen Spinkomponente. Eine weitere und insbesondere für diese Arbeit zentrale Größe stellt die zusammenhängende Zweipunkt-Korrelationsfunktion G dar, die die Korrelation zwischen zwei Spins im Abstand $|\mathbf{x}|$ voneinander angibt und zur späteren Bestimmung der gewünschten Spektralfunktionen unerlässlich ist. Die Korrelationsmatrix G_{ab} wird allgemein definiert durch

$$\begin{aligned} G_{ab}(\mathbf{x}) &= \langle s_a(\mathbf{0}) s_b(\mathbf{x}) \rangle - \langle s_a(\mathbf{0}) \rangle \langle s_b(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \langle (s_a(\mathbf{0}) - \langle s_a(\mathbf{0}) \rangle) (s_b(\mathbf{x}) - \langle s_b(\mathbf{x}) \rangle) \rangle, \end{aligned} \quad (1.22)$$

woraus für die totale Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} G_{tot}(\mathbf{x}) &= \sum_a G_{aa}(\mathbf{x}) \\ &= \langle \mathbf{s}(\mathbf{0}) \mathbf{s}(\mathbf{x}) \rangle - \langle \mathbf{s}(\mathbf{0}) \rangle \langle \mathbf{s}(\mathbf{x}) \rangle \end{aligned} \quad (1.23)$$

folgt. Da aufgrund der Translationsinvarianz der Erwartungswert des Einzelspins $\langle \mathbf{s}_i \rangle$ nicht vom Gitterplatz i abhängt, gilt

$$\langle \mathbf{s}_i \rangle = \frac{1}{V} \sum_j \langle \mathbf{s}_j \rangle = \langle \mathbf{s} \rangle. \quad (1.24)$$

Dies führt dann zu

$$G_{tot}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{s}(\mathbf{0}) \mathbf{s}(\mathbf{x}) \rangle - \langle \mathbf{s} \rangle^2. \quad (1.25)$$

Als Folge der Zerlegung der Spinvektoren in einen zum angelegten Feld parallelen und einen senkrechten Anteil kann analog zur Suszeptibilität und als direkte Folge des Fluktuations-Dissipations-Theorems [14] die Korrelationsmatrix in der Form

$$G_{ab}(\mathbf{x}) = G_L(\mathbf{x}) n_a n_b + G_T(\mathbf{x}) (\delta_{ab} - n_a n_b) \quad (1.26)$$

und

$$G_{tot}(\mathbf{x}) = G_L(\mathbf{x}) + (N-1) G_T(\mathbf{x}) \quad (1.27)$$

mit Hilfe der longitudinalen und transversalen Korrelationsfunktion geschrieben werden. Diese ergeben sich zu

$$G_L(\mathbf{x}) = \langle s_{\parallel}(\mathbf{0}) s_{\parallel}(\mathbf{x}) \rangle - \langle s_{\parallel} \rangle^2 \quad (1.28)$$

und

$$G_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{N-1} \langle \mathbf{s}^\perp(\mathbf{0}) \mathbf{s}^\perp(\mathbf{x}) \rangle. \quad (1.29)$$

Die Korrelationsfunktionen können durch das Fluktuations-Dissipations-Theorem [14] mit den Suszeptibilitäten über den folgenden Zusammenhang in Verbindung gebracht werden

$$\chi_{ab} = \sum_{\mathbf{x}} G_{ab}(\mathbf{x}) = \tilde{G}_{ab}(\mathbf{0}), \quad (1.30)$$

wobei \tilde{G} die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion bezeichnet. Für den longitudinalen und den transversalen Anteil erhält man somit

$$\chi_L = \tilde{G}_L(\mathbf{0}) \quad \text{und} \quad \chi_T = \tilde{G}_T(\mathbf{0}). \quad (1.31)$$

Es gilt allgemein die Beziehung

$$\begin{aligned} \chi_{tot} &= \tilde{G}_{tot}(\mathbf{0}) \\ &= \sum_{\mathbf{x}} G_{tot}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{s}(\mathbf{0}) \mathbf{s}(\mathbf{x}) \rangle - \sum_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{s} \rangle^2 \\ &= V \left(\left\langle \mathbf{s}(\mathbf{0}) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \right\rangle - \langle \mathbf{s} \rangle^2 \right) \\ &= V (\langle \mathbf{s}^2 \rangle - \langle \mathbf{s} \rangle^2), \end{aligned} \quad (1.32)$$

die sich damit in Einklang mit der Definition der totalen Suszeptibilität aus Gleichung (1.13) befindet. Von besonderem Interesse ist ebenso die Abstandsabhängigkeit dieser Korrelationsfunktionen $G_L(\mathbf{x})$ und $G_T(\mathbf{x})$ im System. Längs einer Raumrichtung fallen diese exponentiell mit dem Abstand $x = |\mathbf{x}|$ der Spins nach

$$G_L(\mathbf{x}) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} e^{-x/\xi_L} \quad \text{und} \quad G_T(\mathbf{x}) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} e^{-x/\xi_T} \quad (1.33)$$

ab. Dabei bezeichnen ξ_L und ξ_T die exponentiellen Korrelationslängen, wobei die Proportionalität (1.33) nur für den Grenzfall unendlichen Volumens gilt. Das langreichweitige Verhalten der Korrelationsfunktionen macht daher $\xi_{L,T}$ in einem stets endlichen Gittervolumen zu einer schwer zu bestimmenden Größe, wenn $\xi_{L,T} \sim L$. Gerade in der Nähe von T_c ist die Korrelationslänge sehr groß, weshalb hier auch sehr große Gitter benötigt werden. Zusätzlich hat man die Schwierigkeit, daß auch höhere Zustände mit kleineren Korrelationslängen ($\xi_i < \xi$) beitragen können. Dies ist in sofern problematisch, da der ursprüngliche Ansatz (1.33) keine gute Schätzung der exponentiellen Korrelationslänge mehr liefert, sollten diese Beiträge wesentlich von Null verschieden sein.

1.2 Kritisches Verhalten

In der Natur treten *Phasenübergänge* in vielen unterschiedlichen Systemen auf. Es ist daher unter anderem nützlich, ihr Verhalten an einfacheren Spinmodellen zu untersuchen, die das gleiche kritische Verhalten zeigen. Viele wichtige Ergebnisse über Phasenübergänge wurden durch das Studium solcher vereinfachter Modelle gewonnen. Das von uns betrachtete dreidimensionale $O(4)$ -Modelle besitzt wie alle $O(N)$ -Modelle mit mindestens drei Dimensionen für $\mathbf{H} \rightarrow 0$ einen kontinuierlichen Phasenübergang.

1.2.1 Kritische Exponenten

Bei den vorliegenden $O(N)$ -Modellen müssen zwei Parameter im Hamiltonoperator richtig gewählt sein, um zum kritischen Punkt zu gelangen. Dies sind die Temperatur T und das äußere Feld \mathbf{H} . Es ist daher anzunehmen, dass es nur zwei relevante *Skalenvariablen* für diese Modelle gibt [14]. Diese seien u_t mit Eigenwert y_t für die reduzierte Temperatur $t = (T - T_c)/T_c$ und u_h mit Eigenwert y_h für das äußere Feld H .

Mit Hilfe der Renormierungsgruppentheorie [15, 16] erhält man für das Verhalten der freien Energiedichte am kritischen Punkt [17]

$$f_s(u_t, u_h) = b^{-d} f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h). \quad (1.34)$$

Aus der Forderung, dass die Renormierungsgruppentransformation bei endlich vielen Anwendungen analytisch bleibt, folgt, dass auch der Zusammenhang von (u_t, u_h) mit t, H analytisch ist. Im Falle $t = H = 0$ müssen (u_t, u_h) verschwinden, so dass man in der Nähe des kritischen Punktes folgende Form der Skalenvariablen u_t und u_h erhält

$$u_t = c_t t + \mathcal{O}(t^2, H^2) \quad (1.35)$$

$$u_h = c_h H + \mathcal{O}(tH), \quad (1.36)$$

wobei c_t und c_h zwei nicht-universelle metrische Skalenfaktoren darstellen. Im weiteren kann man zwei Fälle unterscheiden, bei denen jeweils eine der beiden Skalenvariablen in spezieller Weise festgelegt wird. Wählt man beispielsweise zunächst $b^{y_t} u_t = \pm 1$, also $b = |u_t|^{-1/y_t}$, so folgt eine erste Form für den singulären Anteil der freien Energiedichte. Es gilt die Identität

$$f_s(u_t, u_h) = |u_t|^{\frac{d}{y_t}} f_s\left(\pm 1, u_h |u_t|^{-\frac{y_h}{y_t}}\right). \quad (1.37)$$

Für kleine Werte von Temperatur $|t|$ und Feld H erhält man mit Hilfe einer Skalenfunktion Φ und bei Vernachlässigung höherer Terme in u_t und u_h den Ausdruck

$$f_s(t, H) = (c_t |t|)^{\frac{d}{y_t}} \Phi_{1\pm} \left(\frac{c_h H}{(c_t |t|)^{\frac{y_h}{y_t}}} \right). \quad (1.38)$$

Genauso berechtigt kann auch b durch die Wahl $b = |u_h|^{-1/y_h}$ festgelegt werden. In diesem Fall erhält man für die renormierte freie Energiedichte (1.34) die Form

$$f_s(u_t, u_h) = |u_h|^{\frac{d}{y_h}} f_s \left(u_t |u_h|^{-\frac{y_t}{y_h}}, \pm 1 \right), \quad (1.39)$$

wodurch sich für kleine Werte von t und $|H|$ mit Hilfe der Skalenfunktion Φ und bei Vernachlässigung höherer Terme in u_t und u_h die zweite Form des singulären Anteils der freien Energiedichte ergibt

$$f_s(t, H) = (c_h |H|)^{\frac{d}{y_h}} \Phi_{2\pm} \left(\frac{c_t t}{(c_h |H|)^{\frac{y_t}{y_h}}} \right). \quad (1.40)$$

An einem kontinuierlichen Phasenübergang können viele thermodynamische Größen nahe der kritischen Temperatur durch einfache Potenzgesetze beschrieben werden, die unmittelbar mit Hilfe Gleichungen (1.38) und (1.40) sowie den Ableitungen der freien Energiedichte hergeleitet werden können. Die dabei in diesen Gesetzen auftretenden Exponenten, welche für das jeweils betrachtete O(N)-Modell charakteristisch sind, nennt man *kritische Exponenten*. Modelle mit gleichen kritischen Exponenten befinden sich in derselben Universalitätsklasse.

Im folgenden soll stets ein positives Feld H und somit den Grenzfall $H \rightarrow 0^+$ betrachtet werden. Für verschwindendes äußeres Feld und einer Temperatur $T < T_c$ bildet sich im System eine spontane Magnetisierung aus, die durch folgende Beziehung gegeben ist

$$\begin{aligned} M(t < 0, H = 0) &= - \lim_{H \rightarrow 0} \left(\frac{\partial f_s}{\partial H} \right) \\ &= - (c_t |t|)^{\frac{d-y_h}{y_t}} c_h \Phi'_{1\pm}(0) \\ &= B (-t)^\beta. \end{aligned} \quad (1.41)$$

$\beta = (d - y_h)/y_t$ bezeichnet hier den charakteristischen kritischen Exponenten. Auch für die anderen Observablen des O(4)-Modells ergeben sich ähnliche Proportionalitäten mit weiteren kritischen Exponenten. Für $T > T_c$ und $H \rightarrow 0$ kann die longitudinale Suszeptibilität χ_L beispielsweise nach doppelter Ableitung

$$\begin{aligned} \chi_L &= - \lim_{H \rightarrow 0} \left(\frac{\partial^2 f_s}{\partial H^2} \right) \\ &= - (c_t |t|)^{\frac{d-2y_h}{y_t}} c_h^2 \Phi''_{1\pm}(0) \\ &= C^+ |t|^{-\gamma} \end{aligned} \quad (1.42)$$

mit dem kritischen Exponenten $\gamma = (d - 2y_h)/y_t$ in Beziehung gebracht werden. Am kritischen Punkt T_c erfordert die Funktion $M(T_c, H)$ jedoch eine andere Vorgehensweise. Hier gilt mit Hilfe von Gleichung (1.40)

$$\begin{aligned} M(T_c, H) &= - \left(\frac{\partial f_s}{\partial H} \right)_{T=T_c} \\ &= B^c H^{\frac{d}{y_h} - 1} \\ &= B^c H^{\frac{1}{\delta}}, \end{aligned} \quad (1.43)$$

mit einem kritischen Exponenten $\delta = \frac{y_h}{d - y_h}$. Für die Korrelationsfunktion $G(\mathbf{x})$ findet man bei $H = 0$ die Form

$$G(\mathbf{x}) = (c_t |t|)^{\frac{2(d - y_h)}{y_t}} \Psi \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(c_t |t|)^{-\frac{1}{y_t}}} \right) \quad (1.44)$$

mit einer weiteren Skalenfunktion Ψ und dem Abstand $r = |\mathbf{x}|$ zwischen zwei Spins. Für große Abstände ist $G \sim \exp(-r/\xi)$, so dass für die Korrelationslänge

$$\xi_{L,T} = \xi^+ |t|^{-\nu} \quad (1.45)$$

mit kritischem Exponent $\nu = \frac{1}{y_t}$ gilt. Betrachtet man die Korrelationsfunktion G am kritischen Punkt, erhält man mit $\eta = d + 2 - 2y_h$ bei großem $|\mathbf{x}|$ den Zusammenhang

$$G(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{|\mathbf{x}|^{d-2+\eta}}. \quad (1.46)$$

Der hier auftretende kritische Exponent η wird auch als anomale Dimension bezeichnet. Für $H \rightarrow 0$ und $T = T_c$ ergeben sich außerdem

$$\chi_{L,T} = C^c H^{-\gamma_c}, \quad (1.47)$$

$$\xi_{L,T} = \xi^c H^{-\nu_c}. \quad (1.48)$$

Die insgesamt sechs gefundenen kritischen Exponenten sind gegeben durch die beiden unabhängigen Eigenwerte

$$y_t = \frac{1}{\nu} \quad \text{und} \quad y_h = \frac{1}{\nu_c}, \quad (1.49)$$

womit tatsächlich nur zwei dieser Exponenten wirklich unabhängig voneinander sind. Es bestehen daher sogenannte Skalenrelationen zwischen diesen kritischen Exponenten, die alle diese Exponenten miteinander in Verbindung bringen und bereits vor dem Zugang durch die Renormierungsgruppentheorie, allerdings nur als Ungleichun-

gen, bekannt waren

$$\begin{aligned}
 2 &= \alpha + 2\beta + \gamma \\
 2 &= \alpha + \beta(1 + \delta) \\
 \alpha &= 2 - d\nu \\
 \gamma &= \nu(2 - \eta) \\
 \nu_c &= \frac{\nu}{\beta\delta} \\
 \gamma_c &= 1 - \frac{1}{\delta}.
 \end{aligned} \tag{1.50}$$

Wie bereits erwähnt, können Modelle, die das gleiche Verhalten zeigen, also die gleichen kritischen Exponenten besitzen, in einer Universalitätsklasse zusammengefaßt werden. Die kritischen Exponenten einer Universalitätsklasse hängen nach der Universalitätshypothese nur von der Dimension des Systems, der Dimension des Ordnungsparameters und der Symmetrie der Wirkung ab. Neben den Exponenten selbst gibt es aber auch andere universelle Größen, wie z. B. bestimmte Quotienten aus den Vorfaktoren der Potenzgesetze, die sogenannten Amplitudenverhältnisse. Darüber hinaus muss festgehalten werden, dass die Gleichungen (1.42) und (1.45) für das O(4)-Modell für $t < 0$ nicht gelten, da aufgrund des Goldstone-Effektes (siehe Kapitel 1.3) die Suszeptibilitäten und Korrelationslängen auf der Koexistenzlinie divergieren.

1.2.2 Corrections to Scaling

Bei einer Entfernung vom kritischen Punkt kann es möglicherweise nötig sein, in den eingeführten Skalenfunktionen Korrekturen durch irrelevante kritische Exponenten und analytische Terme zu berücksichtigen. Alle analytischen und nicht-analytischen Korrekturen zum universellen Verhalten der Skalenfunktion bezeichnet man als *Corrections to Scaling*. Analytische Korrekturen kommen dadurch zustande, dass die linearen Approximationen für die Skalenvariablen u_t und u_h in der Nähe des kritischen Punktes nicht exakt gültig sind. Man findet, dass die analytischen Korrekturen umso größer werden, je weiter man sich vom kritischen Punkt entfernt. In diesem Bereich fallen allerdings die nicht-analytischen Korrekturen viel stärker ins Gewicht, für die bei vielen Modellen auch die ersten irrelevanten Skalenvariablen berücksichtigt werden müssen.

Nimmt man in der freien Energiedichte (1.34) eine zusätzliche Abhängigkeit vom ersten irrelevanten Exponenten y_i an, dessen Skalenvariable u_3 in der Nähe des kritischen Punktes ungefähr konstant bleibt, so ergibt sich die Form

$$f_s(u_t, u_h, u_3) = b^{-d} f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h, b^{y_i} u_3). \tag{1.51}$$

Bei einer Berücksichtigung des ersten nicht-analytischen Korrekturterms mit $y_3 = -\omega$ und des ersten analytischen Korrekturterms, folgt für die Magnetisierung $M = -\partial f_s / \partial H$ [18]

$$M = (-t)^\beta (1 + b_1 (-t)^{\omega\nu} + b_2 (-t)). \quad (1.52)$$

Im Falle des in dieser Arbeit betrachteten O(4)-Modells sind die *Corrections to Scaling* für die Korrelationslängen und die Magnetisierung in der Nähe des kritischen Punktes allerdings im Rahmen der gewünschten Genauigkeit so gering, dass ihre Berücksichtigung nicht erforderlich ist [6, 13].

1.3 Der Goldstone-Effekt

Mathematisch ist der Hamiltonoperator \mathcal{H} des Systems bei Abwesenheit eines äußeren Feldes O(N)-symmetrisch. Es wäre somit zu erwarten, dass die Magnetisierung für alle Temperaturen T verschwindet, da jeder Zustand mit einer bestimmten Magnetisierungsrichtung gleich wahrscheinlich ist. Physikalisch stellt sich aber für Temperaturen kleiner der kritischen Temperatur T_c ein Zustand mit einer konkreten Magnetisierungsrichtung ein. Man spricht dann von einer spontanen Symmetriebrechung, da der Grundzustand für $T < T_c$ nicht die Symmetrie der Hamiltonfunktion besitzt. Die Symmetrie ist allerdings nicht vollkommen verschwunden, denn der Grundzustand ist für niedrige Temperaturen entartet, und jeder dieser Grundzustände besitzt eine O(N-1)-Restsymmetrie in den transversalen Komponenten. Jeder dieser Grundzustände wird mit der gleichen Wahrscheinlichkeit angenommen, doch die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Grundzustand zu einem mit anderer Magnetisierungsrichtung ist nahezu null, da sich dafür ausnahmslos alle Spins gleichzeitig um den gleichen Winkel drehen müßten.

Bei Anwesenheit eines äußeren Feldes ist das Modell nicht mehr symmetrisch unter O(N)-Transformationen, da die Symmetrie nun explizit gebrochen wird. Im Grenzfall $H \rightarrow 0$ ergibt sich wieder eine spontane Symmetriebrechung für $T < T_c$. Für verschwindendes äußeres Feld existieren angeregte Zustände, die auch als Goldstone-Moden bezeichnet werden. Die Energien dieser angeregten Zustände sind nur geringfügig höher als die der Grundzustände. In der Quantenfeldtheorie entsprechen diese niedrigen Energiezustände der Existenz von masselosen Teilchen, die als *Goldstone-Bosonen* bezeichnet werden. Die Goldstone-Moden sind sehr langwellige transversale Spinwellen (Abb. 1.2), die eine Korrelation zwischen den Spins erzeugen. Die Wellenlänge der Spinwellen wächst mit abnehmendem Feld, bis sie für $H = 0$ divergiert. Für die Suszeptibilität als Maß für die Korrelation bedeutet dies die Divergenz auf der gesamten Koexistenzlinie ($T < T_c, H = 0$). Aus diesem Grund stellt der Übergang $H \rightarrow 0$ bei konstanter Temperatur $T < T_c$ für das System einen Phasenübergang dar [19].

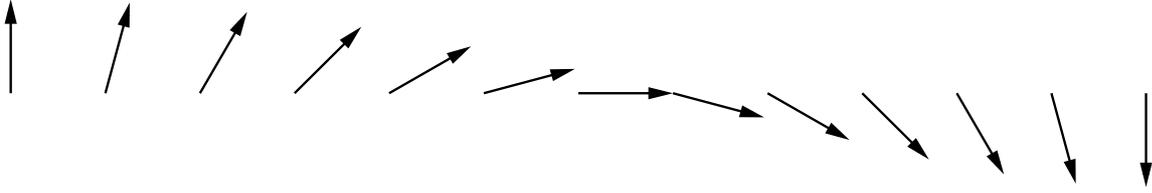


Abbildung 1.2: Spinwelle der transversalen Komponente im $O(N)$ -Modell entlang einer Raumrichtung.

Eine Feynman-Graph-Entwicklung im dreidimensionalen $O(N)$ -Modell liefert für die longitudinale Suszeptibilität χ_L bei kleinem äußeren Feld $H = |\mathbf{H}|$ [19]

$$\chi_L(T < T_c, H) = \tilde{c}_1(T)H^{-\frac{1}{2}} + c_2(T) + \tilde{c}_3(T)H^{\frac{1}{2}} + \dots \quad (1.53)$$

Hieraus folgt unmittelbar, dass die longitudinale Suszeptibilität für kleine Felder proportional zu $H^{-1/2}$ ist. Daraus ergibt sich wegen

$$\chi_L = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (1.54)$$

durch Integration nach H auch eine von $H^{\frac{1}{2}}$ abhängige Form der Magnetisierung zu

$$M(T < T_c, H) = M(T, 0) + c_1(T)H^{\frac{1}{2}} + c_2(T)H + c_3(T)H^{\frac{3}{2}} + \dots \quad (1.55)$$

Die Koeffizienten $c_i(T)$ hängen dabei auch von der inneren Dimension N des $O(N)$ -Modells ab. Für die transversale Suszeptibilität erhält man für alle T und H

$$\chi_T = \frac{M}{H}. \quad (1.56)$$

Aus der Tatsache, daß χ_T für $T < T_c$ und $H = 0$ divergiert, folgt unmittelbar, daß der Zustand bei $H = 0$ nicht stabil gegenüber infinitesimalen, zu \mathbf{M} senkrechten Fluktuationen ist. Die Beziehung aus Gleichung (1.56) ist eine direkte Folge der $O(N)$ -Invarianz der Theorie [20] und kann folgendermaßen berechnet werden. Ausgehend von der reduzierten Hamiltonfunktion $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - V\mathbf{s}\mathbf{H}$ lässt sich über die Zustandssumme (1.2) eine Verteilungsfunktion $w(\mathbf{s})$ des Volumenmittels \mathbf{s} definieren

$$w(\mathbf{s}) = w_0(\mathbf{s}) e^{V\mathbf{s}\mathbf{H}}, \quad (1.57)$$

wobei aus der $O(N)$ -Invarianz des Systems bei verschwindendem äußeren Feld unmittelbar folgt, dass $w_0(\mathbf{s})$ ebenfalls invariant unter Drehungen sein muss und daher nur eine Funktion von \mathbf{s}^2 sein kann. In exponentieller Form erhält man daher den Ausdruck

$$\begin{aligned} w_0(\mathbf{s}) &= e^{-V f_0(\mathbf{s}^2)} \quad \text{und damit} \\ w(\mathbf{s}) &= e^{-V(f_0(\mathbf{s}^2) - \mathbf{s}\mathbf{H})}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Damit lässt sich sofort als effektives thermodynamisches Potential

$$\Phi(\mathbf{s}) = f_0(\mathbf{s}^2) - \mathbf{s}\mathbf{H} \quad \text{mit} \quad Z = \int d\mathbf{s} e^{-V\Phi(\mathbf{s})} \quad (1.59)$$

ablesen. Die Tatsache, dass $\Phi(\mathbf{s})$ korrespondierend mit der freien Energie $F = -(1/\beta) \ln Z$ im thermodynamischen Gleichgewicht minimal wird, führt zu

$$\frac{\partial \Phi}{\partial s_a} = 2s_a f'_0(\mathbf{s}^2) - H_a = 0 \quad (1.60)$$

und daraus folgt

$$\mathbf{H} = 2\mathbf{s}_e f'_0(\mathbf{s}_e^2), \quad (1.61)$$

wobei $\mathbf{s}_e = \langle \mathbf{s} \rangle = \mathbf{M}$ den Erwartungswert von \mathbf{s} im thermodynamischen Gleichgewicht bezeichnet. Hieraus lässt sich somit unmittelbar ableiten, dass die Magnetisierung M direkt proportional zum äußeren Feld \mathbf{H} ist. Geht nun $|\mathbf{H}| \rightarrow 0$, so wird Gleichung (1.61) im Bereich $T > T_c$ unabhängig von $f'_0(\mathbf{s}_e^2)$ stets erfüllt, da in der symmetrischen Phase die Magnetisierung für verschwindendes äußeres Feld ebenfalls gegen den Wert Null strebt. Für $T < T_c$ und verschwindendes äußeres Feld stellt sich jedoch eine spontane, von Null verschiedene Magnetisierung ein, so dass

$$f'_0(\mathbf{s}_e^2) = 0 \quad (1.62)$$

gelten muss, damit Gleichung (1.61) erfüllt werden kann. Die Bedingung (1.62) legt lediglich den Betrag $|\mathbf{s}_e|$, nicht aber dessen Richtung fest. Mit Hilfe der symmetrischen Suszeptibilitätsmatrix aus Gleichung (1.10) gelangt man schließlich zu

$$\begin{aligned} \chi_{ab}^{-1} &= \frac{\partial H_a}{\partial s_{eb}} \\ &= \frac{\partial}{\partial s_{eb}} (2s_{ea} f'_0(\mathbf{s}_e^2)) \\ &= 2\delta_{ab} f'_0(\mathbf{s}_e^2) + 4s_{ea} s_{eb} f''_0(\mathbf{s}_e^2), \end{aligned} \quad (1.63)$$

wobei ein Vergleich mit Gleichung (1.18) auf den Zusammenhang

$$\chi_T^{-1} = 2f'_0(\mathbf{s}_e^2) \quad (1.64)$$

führt, woraus sich unmittelbar mit Gleichung (1.61) die gewünschte Beziehung

$$\chi_T = \frac{M}{H} \quad (1.65)$$

finden lässt. Es sei an dieser Stelle kurz angemerkt, dass die Festlegung in Gleichung (1.62) nicht generell für $O(N)$ -Modelle mit $N > 1$ gemacht werden kann. Für das zweidimensionale $O(2)$ -Modell findet man beispielsweise, wie übrigens generell für $O(N)$ -Modelle mit $N > 1$ und der äußeren Dimension $d \leq 2$, $f'_0(\mathbf{s}_e^2) = \text{const.}$ für den

gesamten Temperaturbereich [17, 21].

Eine alternative Betrachtung führt ebenso schnell auf diesen Zusammenhang, denn unter der Annahme, dass $\mathbf{M} = M\mathbf{n}$ parallel zu $\mathbf{H} = H\mathbf{n}$ ist, bewirkt eine kleine Änderung des äußeren Feldes immer eine direkte infinitesimale Änderung in der Magnetisierung. Wird also das Feld nun um einen speziellen infinitesimalen Vektor $\delta\mathbf{H} \perp \mathbf{H}$ nach

$$\mathbf{H}' = \mathbf{H} + \delta\mathbf{H} \quad (1.66)$$

geändert, so läßt sich $\delta\mathbf{H}$ durch

$$\delta\mathbf{H} = H(\mathbf{n}' - \mathbf{n}) \quad (1.67)$$

ausdrücken, da der Betrag des Feldes wegen $\mathbf{H} \delta\mathbf{H} = 0$ erhalten bleibt. Der Betrag der Magnetisierung wiederum ist nur abhängig vom Betrag des Feldes und bleibt somit ebenfalls unverändert. Die Änderung der Magnetisierung $\delta\mathbf{M}$ kann daher als

$$\delta\mathbf{M} = \mathbf{M}' - \mathbf{M} = M(\mathbf{n}' - \mathbf{n}) \quad (1.68)$$

geschrieben werden. $\delta\mathbf{M}$ beschreibt eine infinitesimale Änderung der transversalen Magnetisierung, da $\delta\mathbf{M}$ senkrecht zur ursprünglichen (longitudinalen) Magnetisierung steht. Mit (1.67) und (1.68) ergibt sich dann für die transversale Suszeptibilität die Beziehung

$$\chi_T = \frac{\delta\mathbf{M}}{\delta\mathbf{H}} = \frac{M}{H}. \quad (1.69)$$

Andere Beispiele für Teilchen, die Goldstone-Moden repräsentieren, sind Phononen in Kristallen, wo die Translationsinvarianz spontan gebrochen wird, oder die π -Mesonen in der QCD bei der spontanen Brechung der chiralen Symmetrie. In der Quantenfeldtheorie entsprechen diese niedrigen Energiezustände im allgemeinen den im nächsten Kapitel erwähnten Goldstone-Bosonen.

1.4 Zusammenhang zwischen $O(4)$ und QCD

Die Lagrangedichte der QCD

$$\mathcal{L}_{QCD} = \sum_{f,a} \bar{\Psi}_a^f(x) (i\not{D} - m_f) \Psi_a^f(x) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} \quad (1.70)$$

ist für zwei Quarkflavours mit Quarkmasse $m_q = 0$ symmetrisch unter chiralen Transformationen der Gruppe $SU(2)_L \times SU(2)_R \times U(1)_{L+R}$, d.h. Symmetrie unter unabhängigen globalen unitären Transformationen der links- und rechtshändigen

Quarkfelder und einer vektoriiellen $U(1)_V$ -Transformation, die zur Baryonenanzahl-erhaltung gehört. Eine zusätzliche axiale $U(1)_A$ -Symmetrie hätte $U(2)_L \times U(2)_R$ -Symmetrie zur Folge, doch $U(1)_A$ ist eine Symmetrie der klassischen Theorie, nicht eine der Quantenfeldtheorie [22]. Die chirale Symmetrie ist bei kleinen Temperaturen spontan zu $SU(2)_{L+R} \times U(1)_{L+R}$ gebrochen und wird bei ausreichend hohen Temperaturen restauriert. Der einfachste Ordnungsparameter dieses Phasenüberganges ist der Erwartungswert des chiralen Kondensats

$$\mathcal{M}_{i,j} \equiv \langle \bar{\Psi}_{L,i} \Psi_{R,j} \rangle \quad \text{und} \quad \mathcal{M}_{i,j}^\dagger \equiv \langle \bar{\Psi}_{R,i} \Psi_{L,j} \rangle, \quad (1.71)$$

der unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur T_c einen von Null verschiedenen Wert annimmt und damit die chirale Symmetrie berich. \mathcal{M} ist dabei eine 2×2 -Matrix im Flavourraum.

Unter der Annahme, dass dieser Phasenübergang zweiter Ordnung ist, kann er durch ein effektives Modell in der selben Universalitätsklasse beschrieben werden. Wendet man für den chiralen Ordnungsparameter (1.71) die Transformation

$$\mathcal{M} \longrightarrow U^\dagger \mathcal{M} V \quad (1.72)$$

mit $U, V \in U(2)$ an, so erhält man die volle $U(2)_L \times U(2)_R$ -Symmetrie, welche allerdings auch die axiale Symmetrie $U(1)_A$ enthält. Um dieses Problem zu lösen, wird die Matrix \mathcal{M} auf Vielfache von unitären Matrizen mit positiver Determinante beschränkt. \mathcal{M} bleibt unter der Transformation (1.72) aber nur dann in einer abgeschlossenen Klasse, wenn U und V gleiche Phasen haben. Dabei verschwindet die axiale $U(1)_A$ -Symmetrie [3].

Die Temperatur T und das Magnetfeld H können als die äußeren Parameter des O(4)-Modells mit den Parametern der QCD (Kopplung g und Quarkmasse m_q) über

$$t \sim \frac{6}{g^2} - \frac{6}{g_c^2(0)} \quad (1.73)$$

und

$$H \sim m_q a N_\tau \quad (1.74)$$

in Verbindung gebracht werden [23, 24]. Dabei ist $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ wieder die reduzierte Temperatur und $g_c(0)$ die kritische Kopplung im Limes $m_q \rightarrow 0$. a steht für die Gitterkonstante und N_τ ist wie üblich die Ausdehnung des Gitters in der Zeitrichtung. Das chirale Kondensat der QCD aus Gleichung (1.71) entspricht im chiralen Limes der Magnetisierung als Ordnungsparameter des Spinmodells. Die 2×2 -Matrix \mathcal{M} kann durch die reellen Parameter $(\sigma, \pi_1, \pi_2, \pi_3)$ ausgedrückt werden, so daß

$$\mathcal{M} = \sigma + i \boldsymbol{\pi} \boldsymbol{\tau} \quad (1.75)$$

gilt, wobei die τ_k die Pauli-Matrizen darstellen. Es ist somit möglich, der Matrix \mathcal{M} einen vierkomponentiger Vektor $\boldsymbol{\phi} = (\sigma, \boldsymbol{\pi})$ zuzuordnen, dessen erste Komponente

das σ -Meson und die restlichen Komponenten die Pionen als Goldstone-Teilchen repräsentieren. Der chiralen Transformation (1.72) entspricht dann eine einfache O(4)-Rotation des Vektors ϕ [3]. Zur Beschreibung des Phasenübergangs kann damit die Eigenschaft von $\langle\sigma\rangle = 0$ oberhalb und $\langle\sigma\rangle \neq 0$ unterhalb des Übergangspunktes verwendet werden. Im übrigen gilt stets $\langle\boldsymbol{\pi}\rangle = 0$. Es gilt somit festzuhalten, dass der chirale Phasenübergang der QCD zweier masseloser Quarkflavours unter der Voraussetzung, dass dieser Phasenübergang auch zweiter Ordnung ist, dieselbe Symmetrie hat wie der des dreidimensionalen O(4)-Modells [2, 3].

In der Nähe des kritischen Punktes ist es möglich, über die Massen des σ -Mesons und der Pionen eine Aussage zu treffen. Zunächst muss allerdings geklärt werden, was im O(4)-Modell mit dem Begriff der „Masse“ gemeint ist. Hierzu gibt es zwei verschiedene Interpretationen, wobei die Masse einerseits als inverse Korrelationslänge oder andererseits mit Hilfe der Suszeptibilitäten eingeführt werden kann. Über die Korrelationsmatrix

$$G_{ij}(\mathbf{x}) = \langle\phi^i(\mathbf{0})\phi^j(\mathbf{x})\rangle - \langle\phi^i(\mathbf{0})\rangle^2, \quad (1.76)$$

wobei $i, j = 0, 1, 2, 3$ und $\phi^0 = \sigma$ sowie $\phi^k = \pi_k$ für $k = 1, 2, 3$ gilt, kann man die Massen der Mesonen auf folgende Weise durch

$$m_\sigma^{-2} = \int d\mathbf{x} G_{00}(\mathbf{x}) \quad (1.77)$$

und

$$m_\pi^{-2} \delta_{ij} = \int d\mathbf{x} G_{ij}(\mathbf{x}) \quad (1.78)$$

für $i, j \geq 1$ definieren [3]. Ein direkter Vergleich dieser Korrelationsmatrix $G_{ij}(\mathbf{x})$ mit den im Kapitel 1.1 in den Gleichungen (1.28) und (1.29) eingeführten Korrelationsfunktionen $G_L(\mathbf{x})$ und $G_T(\mathbf{x})$ des O(4)-Spinmodells führt auf die folgenden Zusammenhänge

$$m_\sigma^{-2} = \sum_{\mathbf{x}} G_L(\mathbf{x}) = \chi_L \quad (1.79)$$

und

$$m_\pi^{-2} = \sum_{\mathbf{x}} G_T(\mathbf{x}) = \chi_T. \quad (1.80)$$

Dabei wurde die Integration in den Gleichungen (1.77) und (1.78) durch die Summation auf dem diskreten Gitter ersetzt. Es zeigt sich demnach, dass bei dieser Art der statistischen Massendefinition die Massen der Mesonen im direkten Zusammenhang mit den durch Gittersimulationen des O(4)-Modells meßbaren Suszeptibilitäten stehen. Darüber hinaus kann man die in Gleichung (1.33) eingeführten Korrelationsfunktionen als exponentiell mit einer Masse m abfallende Propagatoren betrachten, womit sich direkt die Beziehung $m \sim 1/\xi$ aufstellen lässt. Da das σ -Meson der longitudinalen Komponente und die Pionen den transversalen Komponenten des vierdimensionalen Vektors ϕ entsprechen, lässt sich eine Identifikation

der Mesonenmassen mit den Korrelationslängen gemäß

$$m_\sigma \sim \frac{1}{\xi_L} \quad \text{und} \quad m_\pi \sim \frac{1}{\xi_T} \quad (1.81)$$

durchführen.

Kapitel 2

Spektrale Darstellung der Korrelationsfunktionen

Kernstück dieser Arbeit ist die Extraktion der Spektralfunktionen aus den longitudinalen und transversalen Korrelationsfunktionen des $O(4)$ -Spinmodells. Es ist daher zunächst sinnvoll, sich etwas intensiver mit den theoretischen Vorhersagen für die Korrelationsfunktionen und den zu ihnen gehörenden Korrelationslängen zu beschäftigen. Dies soll im ersten Abschnitt dieses Kapitels geschehen. Unmittelbar daran anschließend wird eine kurze Einführung der Spektralfunktionen und deren Bedeutung in der Elementarteilchenphysik gegeben, bevor wir in den letzten beiden Abschnitten Überlegungen zur geeigneten Wahl des für die numerische Analyse der Spektralfunktionen notwendigen *Default-Modells* und zur Untersuchung der Beziehung zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion durchführen werden.

2.1 Korrelationsfunktionen im Kontinuum

Mit Hilfe der von Patashinskii und Pokrovskii durchgeführten Untersuchungen [10, 11] zur hydrodynamischen Instabilität eines $O(N)$ -invarianten physikalischen Systems läßt sich eine Vorhersage über den Zusammenhang von longitudinaler Korrelationsfunktion G_L und transversaler Korrelationsfunktion G_T bei kleinem äußeren Feld machen.

Eine infinitesimale Änderung des Volumenmittels \mathbf{s} senkrecht zur Richtung von \mathbf{H}

ändert, wie bereits in Kapitel 1.3 beschrieben, nur die Richtung, nicht aber den Betrag des Vektors. Mit $\langle \mathbf{s} \rangle = \langle s^\parallel \rangle = M$, $\delta \mathbf{s} = \mathbf{s} - \langle \mathbf{s} \rangle$, $\delta s^\parallel = s^\parallel - M$ und $\delta \mathbf{s}^\perp = \mathbf{s}^\perp$ wegen $\langle \mathbf{s}^\perp \rangle = 0$ findet man

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{s}^2 = 0 &= \delta s^{\parallel 2} + \delta \mathbf{s}^{\perp 2} + 2M\delta s^\parallel \\ &\approx 2M\delta s^\parallel + \delta \mathbf{s}^{\perp 2}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

und daraus folgt

$$\delta s^\parallel = \frac{-1}{2M} \delta \mathbf{s}^{\perp 2}. \quad (2.2)$$

Diese Gleichung gilt auch lokal für nicht-gleichförmige Fluktuationen, die durch langwellige Spinwellen hervorgerufen werden [11]. Für die longitudinale Korrelationsfunktion ergibt sich damit

$$\begin{aligned} G_L(\mathbf{x}) &= \langle s^\parallel(\mathbf{0}) s^\parallel(\mathbf{x}) \rangle - \langle s^\parallel \rangle^2 \\ &= \langle \delta s^\parallel(\mathbf{0}) \delta s^\parallel(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \frac{1}{4M^2} \langle \delta \mathbf{s}^{\perp 2}(\mathbf{0}) \delta \mathbf{s}^{\perp 2}(\mathbf{x}) \rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Unter der Annahme, dass die transversalen Fluktuationen im hydrodynamischen Limes nicht miteinander wechselwirken, folgt wegen des Wegens des Wick'schen Theorems [11]

$$\begin{aligned} \langle \delta \mathbf{s}^{\perp 2}(\mathbf{0}) \delta \mathbf{s}^{\perp 2}(\mathbf{x}) \rangle &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N \langle \delta s_\alpha^{\perp 2}(\mathbf{0}) \delta s_\beta^{\perp 2}(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N 2 \langle \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{0}) \delta s_\beta^\perp(\mathbf{x}) \rangle^2. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dies in Gleichung (2.3) eingesetzt, liefert den folgenden Zusammenhang

$$G_L(\mathbf{x}) = \frac{1}{2M^2} \sum_{\alpha, \beta=1}^N \langle \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{0}) \delta s_\beta^\perp(\mathbf{x}) \rangle^2. \quad (2.5)$$

Für die transversale Korrelationsfunktion ergibt sich wegen der Definition in Gleichung (1.26)

$$\langle \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{0}) \delta s_\beta^\perp(\mathbf{x}) \rangle = (\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta) G_T(\mathbf{x}), \quad (2.6)$$

wobei $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_N) = \frac{\mathbf{H}}{H}$ wieder den Einheitsvektor in Richtung des äußeren Feldes \mathbf{H} bezeichnet. Mit der bereits bekannten Darstellung des Spinvektors

$$\mathbf{s} = s^\parallel \mathbf{n} + \mathbf{s}^\perp \quad \text{mit} \quad \mathbf{s}^\perp \mathbf{n} = 0 \quad (2.7)$$

folgt unmittelbar aus Gleichung (2.6)

$$\langle \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{0}) \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{x}) \rangle = (1 - n_\alpha^2) G_T(\mathbf{x}). \quad (2.8)$$

Wird nun o.B.d.A. $\mathbf{n} = (1, 0, \dots, 0)$ gewählt, dann liefert Gleichung (2.8) für $\alpha = 1$ den Wert 0, für alle anderen $\alpha = 2, \dots, N$ ergibt sich die transversale Korrelationsfunktion zu

$$\langle \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{0}) \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{x}) \rangle = G_T(\mathbf{x}). \quad (2.9)$$

Dieses Resultat bedeutet, dass jede Komponente von \mathbf{s}^\perp die gleiche Korrelationsfunktion gemäß Gleichung (2.9) besitzt. Diese $N - 1$ unabhängigen, freien Felder s_α^\perp für $\alpha = 2, \dots, N$ besitzen jeweils die gleiche Masse

$$m_T = \left(\frac{1}{c_s \chi_T} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.10)$$

Die Konstante c_s steht dabei für die sogenannte *Stiffness* des Systems gegenüber nicht-gleichförmigen Rotationen von \mathbf{s} , die lediglich in der gebrochenen Phase von 1 verschieden ist [11] und bei Kenntnis der transversalen Masse m_T gemäß

$$c_s = \frac{1}{m_T^2 \chi_T} = \frac{H}{m_T^2 M} \quad (2.11)$$

berechnet werden kann. In der symmetrischen Phase sind die Richtungen des Spinvektors \mathbf{s} für zwei Punkte, die weiter als die Korrelationslänge voneinander entfernt sind, statistisch unabhängig. Dies bedeutet, dass eine Festlegung der Richtung von \mathbf{s} an diesen Punkten keine Änderung der Gesamtenergie des Systems hervorruft. In der gebrochenen Phase sind jedoch die Korrelationen langreichweitiger, so dass nicht-gleichförmige Drehungen von \mathbf{s} die Gesamtenergie des Systems erhöhen.

Das Ergebnis für die transversalen Komponenten ist auch verträglich mit der bereits in Kapitel 1.1 vorgenommenen Definition der transversalen Korrelationsfunktion, denn für Gleichung (1.29) erhält man mit $\langle \mathbf{s}^\perp \rangle = 0$

$$\begin{aligned} G_T(\mathbf{x}) &= \frac{1}{N-1} \langle \mathbf{s}^\perp(\mathbf{0}) \mathbf{s}^\perp(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \frac{1}{N-1} \sum_{\beta=2}^N \langle s_\beta^\perp(\mathbf{0}) s_\beta^\perp(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \langle s_\alpha^\perp(\mathbf{0}) s_\alpha^\perp(\mathbf{x}) \rangle \end{aligned} \quad (2.12)$$

für alle $\alpha > 1$. Um nun den direkten Zusammenhang zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion zu erhalten, setzt man das untersuchte Ergebnis

aus Gleichung (2.6) in Gleichung (2.5) ein. Es ergibt sich allgemein

$$\begin{aligned}
 G_L(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2M^2} \sum_{\alpha,\beta=1}^N \langle \delta s_\alpha^\perp(\mathbf{0}) \delta s_\beta^\perp(\mathbf{x}) \rangle^2 \\
 &= \frac{1}{2M^2} \sum_{\alpha,\beta=1}^N ((\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta) G_T(\mathbf{x}))^2 \\
 &= \frac{1}{2M^2} \sum_{\alpha,\beta=1}^N (\delta_{\alpha\beta} + n_\alpha^2 n_\beta^2 - 2\delta_{\alpha\beta} n_\alpha n_\beta) G_T^2(\mathbf{x}) \\
 &= \frac{1}{2M^2} (N + 1 - 2) G_T^2(\mathbf{x}) \\
 &= \frac{N-1}{2M^2} G_T^2(\mathbf{x}). \tag{2.13}
 \end{aligned}$$

Eine Betrachtung der mit Gleichung (2.13) gewonnenen Beziehung von Patashinskii und Pokrovskii (PP-Formel) zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion zeigt klar, dass diese wegen der in den Nenner quadratisch eingehenden Magnetisierung M nur Gültigkeit besitzen kann, wenn M von Null verschieden ist. Dies kann in der gebrochenen Phase für $T < T_c$ jederzeit gewährleistet werden, da sich dort für $H = 0$ eine von Null verschiedene Magnetisierung, die spontane Magnetisierung, einstellt. In der symmetrischen Phase und am kritischen Punkt muss jedoch eine Einschränkung auf $H \neq 0$ gemacht werden, da hier die Magnetisierung für $H = 0$ ebenfalls verschwindet.

Aus Gleichung (2.13) folgt wegen des exponentiellen Abfalls der Korrelationsfunktionen für große Abstände $|\mathbf{x}|$ der Zusammenhang

$$2\xi_L = \xi_T, \tag{2.14}$$

der durch Untersuchungen von Engels et al. in [6] für die kritische Kopplung auch verifiziert werden konnte. Aus dieser Beziehung lässt sich wiederum bei Anwendung von Gleichung (1.81) für den Zusammenhang zwischen longitudinaler und transversaler Masse am kritischen Punkt

$$m_L = 2m_T \tag{2.15}$$

finden. Für ein freies Feld der Masse m_T ergibt sich im Kontinuum als Korrelationsfunktion [16]

$$G_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi c_s} \frac{e^{-m_T|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|}. \tag{2.16}$$

Mit Hilfe dieses Ansatzes erhält man für die in Gleichung (1.31) gegebene und aus dem Kontinuum ($V \rightarrow \infty$) übertragene Beziehung

$$\chi_T = \int d^3x G_T(\mathbf{x}) \tag{2.17}$$

und Verwendung des Ergebnisses aus Gleichung (2.16)

$$\begin{aligned}
\chi_T &= \int_0^\infty d^3x G_T(\mathbf{x}) \\
&= \frac{1}{4\pi c_s} \int_0^\infty d\Omega dr r^2 \frac{e^{-m_T r}}{r} \\
&= \frac{1}{c_s} \int_0^\infty dr r e^{-m_T r} \\
&= \frac{1}{c_s} \left[\frac{e^{-m_T r}}{-m_T} r \right]_0^\infty + \frac{1}{cm_T} \int_0^\infty dr e^{-m_T r} \\
&= \frac{1}{c_s m_T^2} = \frac{M}{H} \\
&\sim H^{-1},
\end{aligned} \tag{2.18}$$

wobei M für $H \rightarrow 0$ in die spontane Magnetisierung übergeht. Unter Ausnutzung der analogen Beziehung $\chi_L = \int d^3x G_L(\mathbf{x})$ zusammen mit den Gleichungen (2.16) und (2.13) findet man für die longitudinale Suszeptibilität

$$\begin{aligned}
\chi_L &= \int d^3x G_L(\mathbf{x}) \\
&= \frac{N-1}{2M^2} \int_0^\infty d^3x G_T^2(\mathbf{x}) \\
&= \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{(4\pi c_s)^2} \int_0^\infty d\Omega dr r^2 \frac{e^{-2m_T r}}{r^2} \\
&= \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{4\pi c_s^2} \frac{1}{2m_T} \\
&= \frac{N-1}{2} \frac{1}{8\pi (c_s M)^{3/2}} H^{-\frac{1}{2}} \\
&\sim H^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

In der dargestellten Proportionalität spiegelt sich der Goldstone-Effekt für die longitudinale Suszeptibilität wieder. Diese theoretischen Vorhersagen stimmen mit numerischen Resultaten für das Verhalten der Suszeptibilitäten

$$\chi_L \sim H^{-\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad \chi_T \sim H^{-1} \tag{2.20}$$

in der Nähe der Koexistenzlinie des dreidimensionalen $O(4)$ -Spinmodells überein [4]. Zur Frage des Verhaltens der Korrelationslängen des $O(4)$ -Spinmodells in der gebrochenen Phase in Abhängigkeit vom äußeren Feld haben Fisher und Privman in [12] eine Spinwellen-Analyse für $H \rightarrow 0$ durchgeführt und unter Ausnutzung der Beziehung $\xi_T^2 \sim \chi_T$ das Verhalten der transversalen Korrelationslänge mit

$$\xi_T \sim H^{-\frac{1}{2}} \tag{2.21}$$

ermittelt. Sie schließen dagegen aber gleichzeitig eine Identifikation von ξ_L^2 mit χ_L aus.

2.2 Zweiebenen-Korrelationsfunktionen auf dem Gitter

In dieser Arbeit werden statt der bisher betrachteten Zweipunkt-Korrelationsfunktion aus Gleichung (1.25) analog zu [25] die Zweiebenen-Korrelationen verwendet, da diese mit Hilfe einer Transfermatrix als einfache Summe über mehrere zu verschiedenen energetischen Zuständen gehörende Exponentialterme geschrieben werden können [26]. Dabei werden alle Spins, die sich auf einer Ebene senkrecht zu einer festgelegten Raumrichtung befinden, einem gemeinsamen mittleren Ebenenspin \mathbf{S} zugeordnet. Wählt man beispielsweise die z -Achse als Normalenrichtung, so ergibt sich für den mittleren Ebenenspin

$$\mathbf{S}(z) = \frac{1}{L^2} \sum_x \sum_y \mathbf{s}(\mathbf{x}). \quad (2.22)$$

Man stellt fest, dass der Mittelwert über diese Ebenenspins \mathbf{S}_z dem aus Gleichung (1.9) bekannten Gittermittel über alle einzelnen Spins nach

$$\mathbf{S} = \frac{1}{L} \sum_z \mathbf{S}(z) = \mathbf{s} \quad (2.23)$$

entspricht. Da wegen der Translationsinvarianz auf dem Gitter der Erwartungswert eines Ebenenspins unabhängig vom Ort sein muss, erhält man schließlich die Beziehung

$$\langle \mathbf{S}(z) \rangle = \langle \mathbf{S} \rangle = \langle \mathbf{s} \rangle = M. \quad (2.24)$$

Die eigentliche Definition der Zweiebenen-Korrelationsfunktion $\hat{G}(z)$ kann nun analog zu Gleichung (1.25) erfolgen. Mit dem Erwartungswert des Produktes zweier Ebenenspins $\langle \mathbf{S}(0) \mathbf{S}(z) \rangle$ im Abstand z erhält man

$$\begin{aligned} \hat{G}(z) &= \sum_x \sum_y G(\mathbf{x}) \\ &= L^2 (\langle \mathbf{S}(0) \mathbf{S}(z) \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2), \end{aligned} \quad (2.25)$$

wobei $\langle \mathbf{S} \rangle$ wegen (2.24) gleich der Magnetisierung M des Gesamtsystems ist. Der Faktor L^2 ergibt sich durch die Bedingung, dass auch für die Zweiebenen-Korrelati-

onsfunktion

$$\begin{aligned}
\chi_{tot} &= \sum_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}) = \sum_z \hat{G}(z) \\
&= \sum_z L^2 (\langle \mathbf{S}(0) \mathbf{S}(z) \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2) \\
&= L^2 \left(L \left\langle \mathbf{S} \frac{1}{L} \sum_z \mathbf{S}(z) \right\rangle - \sum_z \langle \mathbf{S} \rangle^2 \right) \\
&= L^3 (\langle \mathbf{S}^2 \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2) \\
&= V (\langle \mathbf{s}^2 \rangle - \langle \mathbf{s} \rangle^2).
\end{aligned} \tag{2.26}$$

gelten soll. Für die beiden anderen Raumrichtungen lassen sich leicht analoge Zusammenhänge finden, wobei für die tatsächliche von uns durchgeführte Messung der Zweiebenen-Korrelationsfunktion das Mittel über alle drei Raumrichtungen betrachtet wurde. Es ergibt sich somit

$$\hat{G}(\tau) = \frac{1}{3} \left(\hat{G}(x) + \hat{G}(y) + \hat{G}(z) \right) \Big|_{\tau=x=y=z} \tag{2.27}$$

für die Abstände $\tau = 0, \dots, L/2$. Die Berechnung der Korrelationsfunktionen kann nun wieder separat für den longitudinalen und den transversalen Anteil der Spins durchgeführt werden. Mit beispielsweise

$$S^{\parallel}(z) = \frac{1}{L^2} \sum_x \sum_y s^{\parallel}(\mathbf{x}) \quad \text{und} \quad \mathbf{S}^{\perp}(z) = \frac{1}{L^2} \sum_x \sum_y \mathbf{s}^{\perp}(\mathbf{x}) \tag{2.28}$$

erhält man für die longitudinale Zweiebenen-Korrelationsfunktion

$$\hat{G}_L(\tau) = L^2 (\langle S^{\parallel}(0) S^{\parallel}(\tau) \rangle - M^2) \tag{2.29}$$

und für den transversalen Kanal

$$\hat{G}_T(\tau) = \frac{L^2}{N-1} \langle \mathbf{S}^{\perp}(0) \mathbf{S}^{\perp}(\tau) \rangle. \tag{2.30}$$

2.3 Die Spektralfunktion

Spektralfunktionen sind für die Elementarteilchenphysik von großem Interesse. Viele Observablen, die aus ihnen abgeleitet werden können, lassen sich im Experiment sehr gut messen. Bedauerlicherweise ist es jedoch nicht so leicht möglich, die Spektralfunktionen selbst zu messen. Auch lassen sie sich nicht unmittelbar aus Gittersimulationen entnehmen. Aus diesem Grunde muss zunächst eine auf dem Gitter

messbare Observable bestimmt werden, aus der sich dann die gesuchte Spektralfunktion berechnen lässt.

Im Kontinuum ist die 2-Punkt-Korrelationsfunktion einer Observablen \mathcal{O} in euklidischer Zeit $\tau \in [0, 1/T]$ im dreidimensionalen Ortsraum gegeben durch

$$\begin{aligned} G(\tau, \mathbf{x}) &= \langle \mathcal{O}(\tau, \mathbf{x}) \mathcal{O}^\dagger(0, \mathbf{0}) \rangle \\ &= T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{-i(\omega_n \tau - \mathbf{p}\mathbf{x})} \tilde{G}(i\omega_n, \mathbf{p}). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Die fouriertransformierte Korrelationsfunktion $\tilde{G}(\omega_n, \mathbf{p})$ hängt dabei von den diskreten Matsubara-Frequenzen ab, die für Bosonen mit $\omega_n = 2\pi T n$ gegeben sind. Diese Korrelationsfunktion erfüllt eine Dispersionsrelation

$$\tilde{G}(i\omega_n, \mathbf{p}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(\omega, \mathbf{p})}{\omega - i\omega_n} d\omega, \quad (2.32)$$

wobei $A(\omega, \mathbf{p})$ die Spektralfunktion darstellt und es gilt [27]

$$A(\omega, \mathbf{p}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{G}(\omega + i\varepsilon, \mathbf{p})}{i\pi}. \quad (2.33)$$

Verwendet man nun die beiden Gleichungen (2.31) und (2.32) zusammen mit der Identität

$$T \sum_n \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{\omega - i\omega_n} = \frac{e^{-\tau\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}} \quad \text{mit} \quad 0 \leq \tau < \frac{1}{T} = \beta \quad (2.34)$$

für die Fouriertransformation eines freien bosonischen Propagators mit $A(\omega, \mathbf{p}) = -A(-\omega, \mathbf{p})$, so ergibt sich als Beziehung zwischen Spektralfunktion und Korrelationsfunktion der folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned} G(\tau, \mathbf{p}) &= T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \tilde{G}(i\omega_n, \mathbf{p}) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} T \sum_n \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{\omega - i\omega_n} A(\omega, \mathbf{p}) d\omega \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\tau\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}} A(\omega, \mathbf{p}) d\omega \\ &= \int_0^{\infty} \frac{e^{-\tau\omega} + e^{(\tau-\beta)\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}} A(\omega, \mathbf{p}) d\omega \\ &= \int_0^{\infty} \frac{\cosh(\omega(\tau - \beta/2))}{\sinh(\beta\omega/2)} A(\omega, \mathbf{p}) d\omega \\ &= \int_0^{\infty} K(\tau, \omega) A(\omega, \mathbf{p}) d\omega. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Die Funktion $K(\tau, \omega)$ steht für den Integrationskern in der Kontinuumsversion, der für die Extraktion der Spektralfunktion aus der auf dem Gitter gemessenen Korrelationsfunktion von essentieller Bedeutung ist und durch den Ausdruck

$$K(\tau_i, \omega) = \frac{\cosh(\omega(\tau_i - \beta/2))}{\sinh(\omega\beta/2)} \quad \text{mit} \quad \tau_i \leq \frac{\beta}{2} \quad \forall \tau_i \quad (2.36)$$

gegeben ist. Es ist leicht zu zeigen, dass sich dieser Kern für $T \rightarrow 0$ auf die einfache Form $K(\tau, \omega) = e^{-\omega\tau}$ reduzieren lässt, denn im Limes $\beta \rightarrow \infty$ gelten

$$\cosh(\omega(\tau - \beta/2)) = \cosh(\omega(\beta/2 - \tau)) \sim \frac{1}{2}e^{\omega(\beta/2 - \tau)} \quad (2.37)$$

und

$$\sinh(\omega\beta/2) \sim \frac{1}{2}e^{\omega\beta/2}. \quad (2.38)$$

Diese Betrachtungen wollen wir nun wieder auf die Zweiebenen-Korrelationsfunktionen übertragen, bei denen die Fouriertransformation zu einer durch die Richtung des äußeren Feldes \mathbf{H} ausgezeichneten Raumrichtung und nicht zur imaginären Zeit erfolgt. Aus der Dispersionsrelation

$$\tilde{G}(ik + i\varepsilon) = \frac{P}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\tilde{G}(\omega + i\varepsilon)}{\omega - ik - i\varepsilon} \quad (2.39)$$

folgt im Grenzwert $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\tilde{G}(ik) = P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{A(\omega)}{\omega - ik} \quad (2.40)$$

mit

$$A(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{G}(\omega + i\varepsilon)}{i\pi} \quad (2.41)$$

als gesuchte Spektralfunktion. Mit der Bedingung $A(\omega) = -A(-\omega)$ für bosonische Operatoren ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{G}(ik) &= \int_0^{\infty} d\omega \left[\frac{A(\omega)}{\omega - ik} + \frac{A(-\omega)}{-\omega - ik} \right] \\ &= \int_0^{\infty} d\omega A(\omega) \left[\frac{1}{\omega - ik} + \frac{1}{\omega + ik} \right] \\ &= \int_0^{\infty} d\omega A(\omega) \frac{2\omega}{\omega^2 + k^2}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Eine Anwendung der Fouriertransformation

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik\tau} \tilde{G}(ik) \quad (2.43)$$

auf Gleichung (2.42) liefert den Zusammenhang

$$G(\tau) = \int_0^{\infty} d\omega A(\omega) e^{-\omega|\tau|} \quad (2.44)$$

der die Grundlage für die folgende Suche nach dem passenden Default-Modell bildet.

2.4 Das Default-Modell

Das *Default-Modell* dient als Ausgangspunkt für die spätere numerische Analyse innerhalb der Maximum Entropie Methode und beinhaltet alles bekannte Vorwissen über die gesuchte Spektralfunktion. Zunächst ist es daher sinnvoll, sich durch einige Vorüberlegungen zur Struktur der gesuchten Spektralfunktionen weitere Informationen zur Konstruktion eines passenden Default-Modells für die spätere numerische Analyse zu verschaffen.

2.4.1 Bestimmung der Kontinuumsversion

Für die transversalen Felder ist die Korrelationsfunktion im Kontinuum bei $T = 0$ im wesentlichen durch den freien Propagator bestimmt. Nach [28] erhält man als transversale Korrelationsfunktion für ein freies Feld

$$G_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-m_T|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \tilde{G}_T(\mathbf{p}) \quad (2.45)$$

mit

$$\tilde{G}_T(\mathbf{p}) = \frac{1}{p^2 + m_T^2} \quad \text{und} \quad p = |\mathbf{p}|. \quad (2.46)$$

Da wir uns bereits im euklidischen Raum befinden, kann zukünftig das i in der Fouriertransformierten vernachlässigt werden. Der Check über die umgekehrte Fouriertransformation

$$\begin{aligned} \tilde{G}_T(\mathbf{p}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} G_T(\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\cos\theta e^{-ipr\cos\theta} \frac{e^{-m_T r}}{r} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty dr r \int_{-1}^1 d\cos\theta e^{-ipr\cos\theta} e^{-m_T r} \\ &= \frac{1}{2ip} \int_0^\infty dr e^{-m_T r} (e^{ipr} - e^{-ipr}) \\ &= \frac{1}{2ip} \left[\frac{-1}{ip - m_T} + \frac{1}{-ip - m_T} \right] \\ &= \frac{1}{p^2 + m_T^2} \quad \text{q.e.d.} \end{aligned} \quad (2.47)$$

mit $r = |\mathbf{x}|$ liefert den richtigen Propagator. Da durch das äußere Feld \mathbf{H} eine Richtung besonders ausgezeichnet wird, ist es nützlich, im folgenden lediglich die

Ebenen-Korrelation, beispielsweise in z -Richtung für $\mathbf{p}^\perp = 0$ mit $z = \tau$ näher zu betrachten. Durch die Projektion der transversalen Impulskomponenten auf $\mathbf{p}^\perp = 0$ ergibt sich für die transversale Korrelationsfunktion mit $p^2 = p^{\perp 2} + k^2$

$$\begin{aligned}\tilde{G}_T(k) &= \tilde{G}_T(\mathbf{p}^\perp = 0, k) \\ &= \frac{1}{k^2 + m_T^2}\end{aligned}\quad (2.48)$$

und

$$\begin{aligned}G_T(\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ik\tau}}{k^2 + m_T^2} \\ &= \frac{e^{-m_T|\tau|}}{2m_T}.\end{aligned}\quad (2.49)$$

Zusammen mit Gleichung (2.44) erhält man als Default-Modell für die transversale Spektralfunktion

$$A_T^D(\omega) = \frac{\delta(\omega - m_T)}{2\omega}.\quad (2.50)$$

Nach dem Gaußschen Modell ist im Kontinuum als Spektralfunktion der transversalen Korrelationsfunktion natürlich ein Einteilchen-Beitrag bei $\omega = m_T$ zu erwarten. Im longitudinalen Kanal liefert die Korrelationsfunktion aus Gleichung (2.45) unter der Annahme von Gleichung (2.13) die Beziehung

$$G_L(\mathbf{x}) = \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{e^{-2m_T|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|^2}.\quad (2.51)$$

Für die Fouriertransformierte der longitudinalen Korrelationsfunktion erhält man damit

$$\begin{aligned}\tilde{G}_L(\mathbf{p}) &= \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} G_L(\mathbf{x}) \\ &= \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{(4\pi)^2} \int d\Omega r^2 dr \frac{e^{-2m_T r}}{r^2} e^{-ipr \cos \theta} \\ &= \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^\infty dr e^{-2m_T r} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d \cos \theta e^{-ipr \cos \theta} \\ &= \frac{N-1}{4M^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dr e^{-2m_T r} \left[\frac{e^{-ipr \cos \theta}}{-ipr} \right]_{-1}^1 \\ &= \frac{N-1}{4M^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dr e^{-2m_T r} \frac{e^{-ipr} - e^{ipr}}{-ipr} \\ &= \frac{N-1}{4M^2} \frac{1}{4\pi p} I_1(p),\end{aligned}\quad (2.52)$$

mit

$$I_1(p) = \int_0^\infty dr \frac{1}{ir} e^{-2m_T r} (e^{ipr} - e^{-ipr}),\quad (2.53)$$

sowie $p = |\mathbf{p}|$ und $r = |\mathbf{x}|$. Zur Lösung des verbliebenen Integrals $I_1(p)$ lassen sich mit Hilfe der Ableitung nach p die folgenden Überlegungen anstellen:

$$\begin{aligned}
 \frac{dI_1(p)}{dp} &= \int_0^\infty dr \frac{1}{r} e^{-2m_T r} (r e^{ipr} + r e^{-ipr}) \\
 &= \int_0^\infty dr [e^{-(2m_T - ip)r} + e^{-(2m_T + ip)r}] \\
 &= \left[-\frac{1}{2m_T - ip} e^{-(2m_T - ip)r} - \frac{1}{2m_T + ip} e^{-(2m_T + ip)r} \right]_0^\infty \\
 &= \frac{1}{2m_T - ip} + \frac{1}{2m_T + ip} \\
 &= \frac{4m_T}{(2m_T)^2 + p^2}.
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Führt man nun die Integration über p mit der Anfangsbedingung $I_1(0) = 0$ wieder aus, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
 I_1(p) &= \int_0^p dp' \frac{4m_T}{(2m_T)^2 + p'^2} \\
 &= 2 \arctan\left(\frac{p}{2m_T}\right).
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Setzt man dieses Resultat nun in Gleichung (2.52) ein, folgt für die Fouriertransformierte der longitudinalen Korrelationsfunktion:

$$\tilde{G}_L(\mathbf{p}) = \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{4\pi p} \arctan\left(\frac{p}{2m_T}\right). \tag{2.56}$$

Erneut wird nun die Ebenen-Korrelation für $\mathbf{p}^\perp = 0$ mit $z = \tau$ näher betrachtet. Die longitudinale Ebenen-Korrelationsfunktion erhält man durch eine erneute Fouriertransformation

$$\begin{aligned}
 \hat{G}_L(\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik\tau} \tilde{G}_L(\mathbf{p}^\perp = 0, k) \\
 &= C \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik\tau} \frac{1}{|k|} \arctan\left(\frac{|k|}{2m_T}\right),
 \end{aligned} \tag{2.57}$$

mit $C = \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{8\pi^2}$. Eine Auswertung des Integrals $I_2(\tau)$ in $G_L(\tau) = C \cdot I_2(\tau)$ ergibt:

$$\begin{aligned}
 I_2(\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik\tau} \frac{1}{|k|} \arctan\left(\frac{|k|}{2m_T}\right) \\
 &= \int_0^\infty dk (e^{ik\tau} + e^{-ik\tau}) \frac{1}{k} \arctan\left(\frac{k}{2m_T}\right) \\
 &= 2 \int_0^\infty dk \frac{\cos(k\tau)}{k} \arctan\left(\frac{k}{2m_T}\right).
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

Mit den Substitutionen $v = 2m_T\tau$ und $t = k\tau$ folgt daraus

$$I_2(v) = 2 \int_0^\infty dt \frac{\cos t}{t} \arctan\left(\frac{t}{v}\right). \quad (2.59)$$

Durch Ableitung nach v und anschließende Substitution $s = t/v$ mit $ds = dt/v$ und $v > 0$ erhält man

$$\begin{aligned} \frac{dI_2(v)}{dv} &= 2 \int_0^\infty dt \frac{\cos t}{t} \frac{-\frac{t}{v^2}}{1 + \left(\frac{t}{v}\right)^2} \\ &= -\frac{2}{v} \int_0^\infty ds \frac{\cos(vs)}{1 + s^2} \\ &= -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{\cos(vs)}{1 + s^2} \\ &= -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{e^{ivs} + e^{-ivs}}{2(1 + s^2)} \\ &= -\frac{\pi}{v} \cdot \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{e^{ivs}}{1 + s^2} \\ &= -\frac{\pi}{v} \cdot e^{-|v|}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Wird wiederum die Integration über v mit der Anfangsbedingung $I_2(\infty) = 0$ ausgeführt, so ergibt sich

$$\begin{aligned} I_2(v) &= \int_v^\infty dv' \frac{\pi}{v'} e^{-v'} \\ &= -\pi Ei(-v) \\ &= \pi E_1(v) \end{aligned} \quad (2.61)$$

mit

$$E_1(u) = \int_u^\infty dv \frac{e^{-v}}{v} = \int_1^\infty dv \frac{e^{-uv}}{v}. \quad (2.62)$$

Für die longitudinale Ebenen-Korrelationsfunktion aus Gleichung (2.57) erhält man schließlich

$$G_L(\tau) = \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{8\pi} E_1(2m_T\tau), \quad (2.63)$$

wodurch sich mittels Gleichung (2.44) im longitudinalen Kanal folgender direkter Zusammenhang zwischen Korrelations- und Spektralfunktion ergibt

$$\begin{aligned} G_L(\tau) &= \frac{N-1}{16\pi M^2} \int_1^\infty dv \frac{e^{-2m_T\tau v}}{v} \\ &= \frac{N-1}{16\pi M^2} \int_{2m_T}^\infty d\omega \frac{e^{-\omega\tau}}{\omega}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Somit lässt sich als Default-Modell für die longitudinale Spektralfunktion festhalten

$$A_L^D(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{für } \omega < 2m_T \\ \frac{N-1}{16\pi M^2} \frac{1}{\omega} & \text{für } \omega \geq 2m_T \end{cases} \quad (2.65)$$

2.4.2 Übertragung auf das Gitter

Die in den Gleichungen (2.50) und (2.65) gefundenen Ausdrücke für das Default-Modell im transversalen und longitudinalen Kanal gelten für die Betrachtungen im Kontinuum und müssen folglich auf eine äquivalente Gitterformulierung übertragen werden. Es sei nun ein endliches Gitter der Länge L mit periodischen Randbedingungen gegeben. Für die Zweiebenen-Korrelationsfunktion einer diskreten Variable $z_n = \tau_n = na$ gilt aufgrund der periodischen Randbedingungen

$$\hat{G}(\tau_n) = \hat{G}(\tau_n + aL) \quad \text{für } n = 0, 1, \dots, L-1. \quad (2.66)$$

Hieraus folgt unmittelbar für die diskreten Impulse

$$k_n = \frac{2\pi n}{aL}, \quad (2.67)$$

sowie durch die Einschränkung auf die erste Brillouinzone $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ die Festlegung

$$n = \begin{cases} 0, \pm 1, \dots, \pm \left(\frac{L}{2} - 1\right), \frac{L}{2} & \text{für } L \text{ gerade} \\ 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{L-1}{2} & \text{für } L \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (2.68)$$

Die Impulsverteilung erhält man wieder durch die fouriertransformierte Korrelationsfunktion $\tilde{G}(k)$ gemäß

$$\begin{aligned} \hat{G}(\tau) &= \frac{1}{aL} \sum_{k_n} e^{ik_n\tau} \tilde{G}(k_n) \\ \tilde{G}(k) &= a \sum_{n=0}^{L-1} e^{-ik\tau_n} \hat{G}(\tau_n). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen und der Annahme, dass die transversale Korrelationsfunktion auf dem Gitter durch einen 1-Pol-Korrelator bestimmt wird, erhält man mit $\tau_n \geq 0$ und $La - \tau_n > 0$ die Form

$$\hat{G}_T(\tau) = \kappa \left(e^{-\omega\tau} + e^{-\omega(La-\tau)} \right), \quad (2.70)$$

wobei κ eine bisher noch unbekannte Konstante darstellt. Da für die transversale Suszeptibilität χ_T gleichzeitig die Beziehungen

$$\chi_T = \sum_{n=0}^{L-1} \hat{G}_T(\tau_n) \quad \text{und} \quad \chi_T = \frac{M}{H} \quad (2.71)$$

gelten müssen, lässt sich hierdurch die Normierungskonstante κ leicht bestimmen. Man erhält

$$\begin{aligned} \frac{M}{H} &= \kappa \cdot (1 - e^{-\omega La}) \coth\left(\frac{\omega a}{2}\right) \\ \Rightarrow \kappa &= \frac{M}{H} \tanh\left(\frac{\omega a}{2}\right) \frac{1}{(1 - e^{-\omega La})}. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Setzt man dieses Ergebnis in Gleichung (2.70) ein, so ergibt sich als transversale Korrelationsfunktion

$$\hat{G}_T(\tau) = \frac{M}{H} \frac{\tanh\left(\frac{\omega a}{2}\right)}{(1 - e^{-\omega La})} (e^{-\omega\tau} + e^{-\omega(La-\tau)}). \quad (2.73)$$

Mit Gleichung (2.69) folgt für die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} \tilde{G}_T(k) &= a \kappa \sum_{n=0}^{L-1} e^{-ik\tau_n} (e^{-\omega\tau_n} + e^{-\omega(La-\tau_n)}) \\ &= a \kappa \sum_{n=0}^{L-1} (e^{-(\omega+ik)\tau_n} + e^{-\omega La} e^{(\omega-ik)\tau_n}). \end{aligned} \quad (2.74)$$

Es gilt nun, die Summation über die beiden e-Funktionen auszuführen, für die man mit

$$p = e^{-(\omega+ik)a} \quad \text{und} \quad q = e^{(\omega-ik)a} \quad (2.75)$$

und $kLa = 2\pi m$ erhält:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^L p^n &= p \frac{1-p^L}{1-p} = e^{-(\omega+ik)a} \frac{1-e^{-\omega La}}{1-e^{-(\omega+ik)a}} \\ \sum_{n=1}^L q^n &= q \frac{1-q^L}{1-q} = e^{(\omega-ik)a} \frac{1-e^{\omega La}}{1-e^{(\omega-ik)a}}. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Diese Ergebnisse in Gleichung (2.74) eingesetzt, liefert

$$\begin{aligned} \tilde{G}_T(k) &= a \kappa e^{-ika} \left[e^{-\omega a} \frac{1-e^{-\omega La}}{1-e^{-(\omega+ik)a}} + e^{\omega a} \frac{e^{-\omega La} - 1}{1-e^{(\omega-ik)a}} \right] \\ &= a \kappa e^{-ika} (1-e^{-\omega La}) \frac{e^{-\omega a} - e^{-ika} - e^{\omega a} + e^{-ika}}{1 + e^{-2ika} - e^{-ika} (e^{-\omega a} + e^{\omega a})} \\ &= \kappa (1-e^{-\omega La}) \frac{\frac{2}{a} \sinh(\omega a)}{\frac{4}{a^2} \sinh^2\left(\frac{\omega a}{2}\right) + \frac{4}{a^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Gleichung (2.77) entspricht den Berechnungen von Spin-Korrelatoren auf endlichen Gittern durch Engels et al. (vgl. Gleichung (13) in [26] für $a = 1$). Auf dem Gitter besitzt die Korrelationsfunktion demnach die in Gleichung (2.70) angenommene Form und liefert für $L \rightarrow \infty$ und $a \rightarrow 0$ die Kontinuumsversion.

Der Vollständigkeit halber sollen an dieser Stelle auch das Resultat für das Kontinuum bei endlicher Ausdehnung $L = V^{1/d}$ angegeben werden. Es ergibt sich bei analoger Vorgehensweise unter der Annahme

$$\hat{G}(\tau) = \kappa (e^{-\omega\tau} + e^{-\omega(L-\tau)}) \quad (2.78)$$

als Propagator

$$\tilde{G}(k) = \kappa (1 - e^{-\omega L}) \frac{2\omega}{\omega^2 + k^2}. \quad (2.79)$$

2.5 Zusammenhang zwischen den Korrelationsfunktionen auf dem Gitter

Erweitert man die zur Bestimmung des Default-Modells durchgeführten Betrachtungen auf drei Raumdimensionen eines Gitters der Ausdehnung $V = (aL)^3$ mit periodischen Randbedingungen, so folgt für den Ortsvektor

$$\mathbf{x} = (n_1, n_2, n_3) a \quad \text{mit} \quad n_i = 0, \dots, L - 1 \quad (2.80)$$

und für die diskreten Impulse

$$\mathbf{p} = \frac{2\pi}{aL} (m_1, m_2, m_3) \quad (2.81)$$

mit

$$m_i = \begin{cases} 0, \pm 1, \dots, \pm \left(\frac{L}{2} - 1\right), \frac{L}{2} & \text{für } L \text{ gerade} \\ 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{L-1}{2} & \text{für } L \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (2.82)$$

Den dreidimensionalen Korrelator erhält man wieder durch die fouriertransformierte Korrelationsfunktion $\tilde{G}(\mathbf{p})$ gemäß

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}) &= \frac{1}{(aL)^3} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \tilde{G}(\mathbf{p}) \\ \tilde{G}(\mathbf{p}) &= a^3 \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} G(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.83)$$

wobei für jede einzelne Komponente die Beziehung

$$\sum_{p_i} e^{ip_i x_i} = L \delta_{0, x_i} \quad (2.84)$$

gilt. Zur Vereinfachung setzen wir im folgenden $a = 1$. Unter der Annahme, dass die transversale Korrelationsfunktion komplett durch lediglich einen Pol bei der Masse $\omega = m_T$ beschrieben wird, erhält man den in [26] gegebenen Ausdruck

$$\tilde{G}_T(\mathbf{p}, m_T) = \kappa (1 - e^{-m_T L}) \frac{2 \sinh(m_T)}{4 \sinh^2\left(\frac{m_T}{2}\right) + \sum_{i=1}^3 4 \sin^2\left(\frac{p_i}{2}\right)} \quad (2.85)$$

Bei Verwendung der Beziehung (2.13) zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion folgt für die longitudinale Suszeptibilität χ_L

$$\begin{aligned}
 \chi_L &= \sum_{\mathbf{x}} G_L(\mathbf{x}) \\
 &= \frac{N-1}{2M^2} \sum_{\mathbf{x}} [G_T(\mathbf{x}, m_T)]^2 \\
 &= \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{x}} \tilde{G}_T(\mathbf{p}, m_T) \tilde{G}_T(\mathbf{p}', m_T) \\
 &= \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{p}-\mathbf{p}', 0} \tilde{G}_T(\mathbf{p}, m_T) \tilde{G}_T(\mathbf{p}', m_T) \\
 &= \frac{N-1}{2M^2} \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{p}} [\tilde{G}_T(\mathbf{p}, m_T)]^2, \tag{2.86}
 \end{aligned}$$

da $\tilde{G}_T(\mathbf{p}, m_T) = \tilde{G}_T(-\mathbf{p}, m_T)$ gilt. In der letzten Summe entfallen alle $p_i = \pi$, da für diese die δ -Funktion keinen Beitrag liefert, weil es kein $p'_i = -\pi$ gibt. Setzt man nun die dreidimensionale Fouriertransformierte aus Gleichung (2.85) in diesen Ausdruck ein, so erhält man mit der Konstanten κ aus Gleichung (2.72)

$$\begin{aligned}
 \chi_L &= \frac{N-1}{2M^2} \frac{\kappa^2}{L^3} \sum_{\mathbf{p}} \frac{4 \sinh^2(m_T) (1 - e^{-m_T L})^2}{[4 \sinh^2(\frac{m_T}{2}) + \sum_{i=1}^3 4 \sin^2(\frac{p_i}{2})]^2} \\
 &= \frac{N-1}{2H^2} \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{p}} \frac{(\sinh(m_T) \tanh(\frac{m_T}{2}))^2}{4 [\sinh^2(\frac{m_T}{2}) + \sum_{i=1}^3 \sin^2(\frac{p_i}{2})]^2} \\
 &= \frac{N-1}{2L^3 H^2} \sinh^4\left(\frac{m_T}{2}\right) \sum_{\mathbf{p}} \left[\sinh^2\left(\frac{m_T}{2}\right) + \sum_{i=1}^3 \sin^2\left(\frac{p_i}{2}\right) \right]^{-2}. \tag{2.87}
 \end{aligned}$$

Durch Verwendung der ermittelten transversalen Masse m_T mit dieser Formel müsste sich die richtige longitudinale Suszeptibilität nach $\chi_L = \sum \hat{G}_L$ ergeben, wenn die Gleichung (2.13) gilt.

Für die in dieser Arbeit verwendeten Zweiebenen-Korrelationsfunktionen (2.29) und (2.30) kann nun mit $z = \tau$ über die Beziehung

$$\hat{G}_L(\tau) = \sum_x \sum_y G_L(\mathbf{x}) = \frac{N-1}{2M^2} \sum_x \sum_y [G_T(\mathbf{x})]^2 \tag{2.88}$$

mit Hilfe des gefundenen Ausdrucks für die Fouriertransformierte der transversalen Korrelationsfunktion (2.85) eine zur PP-Formel (2.13) äquivalente Formulierung für die longitudinale Zweiebenen-Korrelationsfunktion gefunden werden. Man erhält

nach wenigen Umformungen

$$\begin{aligned}\hat{G}_L(\tau) &= \frac{N-1}{2L^4H^2} \sinh^4\left(\frac{m_T}{2}\right) \sum_{p_\tau, p'_\tau} e^{i(p_\tau+p'_\tau)\tau} \\ &\cdot \sum_{p_x, p_y} \left[\sinh^2\left(\frac{m_T}{2}\right) + \sum_{i=1}^2 \sin^2\left(\frac{p_i}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{p_\tau}{2}\right) \right]^{-1} \\ &\times \left[\sinh^2\left(\frac{m_T}{2}\right) + \sum_{i=1}^2 \sin^2\left(\frac{p_i}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{p'_\tau}{2}\right) \right]^{-1}. \quad (2.89)\end{aligned}$$

Kapitel 3

Numerische Methoden

3.1 Die Maximum Entropie Methode

Die *Maximum Entropie Methode* (MEM) ist eine gut bekannte Anwendung aus der Physik kondensierter Materie, der Bildrekonstruktion sowie der Astronomie [29, 30, 31] zur Extraktion von Spektralfunktionen aus gegebenen Korrelationen. Mit ihrer Hilfe konnten beispielsweise die Meson-Korrelationsfunktionen bei $T = 0$ erfolgreich untersucht werden [32]. Aber auch Untersuchungen bei endlicher Temperatur konnten mit der Hilfe von MEM erfolgreich durchgeführt werden. Dabei war MEM in der Lage, Massen und Zerfallskonstanten von Grundzuständen und angeregten Zuständen aus Korrelationsfunktionen zu ermitteln [33, 34].

Zwischen der Korrelationsfunktion und Spektralfunktion besteht nach Gleichung (2.35) folgender Zusammenhang:

$$\begin{aligned}\hat{G}(\tau_i) &= \int_0^\infty K(\tau_i, \omega) A(\omega) d\omega \\ &= \sum_{j=0}^{N_\omega} K(\tau_i, \omega_j) A(\omega_j) \Delta\omega \\ &= \sum_{j=0}^{N_\omega} K_{ij} A_j \Delta\omega\end{aligned}\tag{3.1}$$

mit $\omega_j = j \cdot \Delta\omega$ und N_ω als der Anzahl der Diskretisierungsstücke $\Delta\omega$ im Intervall $[0, \omega_{\max}]$. Da zur Rekonstruktion der Spektralfunktion $A(\omega)$ eine Datenmenge in der Größenordnung von $\mathcal{O}(1000)$ Punkten benötigt wird, die Korrelationsfunktionen als Resultat der Gitterrechnungen allerdings aus deutlich weniger Datenpunkten

($\mathcal{O}(10)$) bestehen, kann die Standard- χ^2 -Fit-Methode nicht angewendet werden. Es handelt sich um ein unterbestimmtes System. Nunmehr soll ausgeführt werden, wie MEM zur Lösung dieses im Zusammenhang mit Gleichung (2.35) stehenden Problems genutzt werden kann.

3.1.1 Bayes' Theorem und die Prinzipien von MEM

Nach dem Theorem von Bayes kann die gemeinsame Wahrscheinlichkeit von zwei Ereignissen $P(AB) \doteq P(A \text{ und } B)$ als Term einer bedingten Wahrscheinlichkeit nach

$$P(AB) = P(A|B) P(B) = P(B|A) P(A) \quad \Leftrightarrow \quad P(A|B) = \frac{P(B|A) P(A)}{P(B)} \quad (3.2)$$

berechnet werden, wobei $P(A|B)$ die bedingte Wahrscheinlichkeit des Ereignisses A unter vorgegebenem Ereignis B bezeichnet. Dieses Theorem wird nun dazu verwendet, die Wahrscheinlichkeit $P(A|GH)$ für eine gesuchte Spektralfunktion $A(\omega)$ bei einem gegebenen Datensatz von Korrelationsfunktionen G und dem durch H parametrisierten Vorwissen über diese gesuchte Spektralfunktion nach der Gleichung

$$P(A|GH) = \frac{P(G|AH) P(A|H)}{P(G|H)} \quad (3.3)$$

zu ermitteln. $P(A|GH)$ wird auch als *Posterior*-Wahrscheinlichkeit bezeichnet, und $P(G|AH)$ ist die *Likelihoodfunktion*, die die Wahrscheinlichkeit für die Daten unter Annahme der Spektralfunktion $A(\omega)$ un dem Vorwissen H angibt. Der Term $P(A|H)$ wird als *A priori*-Wahrscheinlichkeit bezeichnet, da in diesen das gesamte bekannte Vorwissen über die gesuchte Spektralfunktion eingeht, so z.B. die Positivität $A(\omega) \geq 0$ für alle $\omega \geq 0$ [32, 35]. Da das gesamte Vorwissen über $A(\omega)$ das bereits in Kapitel 2.4 bestimmte Default-Modells festlegt, gibt $P(A|H)$ somit an, wie gut die gefundene Spektralfunktion dieses Default-Modell erfüllt.

Die Likelihood-Funktion

Nach dem zentralen Grenzwertsatz, der für eine große Anzahl an Messungen eine Gauß-Verteilung der Daten vorhersagt, kann die *Likelihood*-Wahrscheinlichkeit durch

$$P(G|AH) \sim e^{-\Lambda} = e^{-\chi^2/2} \quad (3.4)$$

mit

$$\chi^2 = \sum_{i,j} [F(\tau_i) - G(\tau_i)] C_{ij}^{-1} [F(\tau_j) - G(\tau_j)] \quad (3.5)$$

und $\Lambda = \chi^2/2$ angesetzt werden. $\hat{G}(\tau_i)$ steht hier für den Mittelwert über alle Messungen der Korrelationsfunktion im Abstand τ_i und C_{ij}^{-1} bezeichnet die symmetrische Kovarianzmatrix, die für N Konfigurationen durch die folgende Schätzung approximiert werden kann

$$C_{ij}^{-1} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{m=1}^N [G^m(\tau_i) - G(\tau_i)] [G^m(\tau_j) - G(\tau_j)], \quad (3.6)$$

wobei die Funktion $F(\tau_i)$ durch

$$F(\tau_i) = \int_0^\infty K(\tau_i, \omega) A(\omega) d\omega \hat{=} \sum_i K_{ij} A_j, \quad (3.7)$$

gegeben ist. Im diskretisierten Fall entsprechen $K_{ij} = K(\tau_i, \omega_j)$ dem vordefinierten Kern und $A_j = A(\omega_j)\Delta\omega$ der Spektralfunktion. Die Suche nach dem Maximum der Likelihood-Wahrscheinlichkeit $P(G|AH)$ korrespondiert mit der Suche nach dem Minimum für χ^2 . Ohne jegliches Vorwissen H über die gesuchte Spektralfunktion wäre $P(A)$ unbekannt. Der Einfluss der Apriori-Wahrscheinlichkeit $P(A|H)$ spielt jedoch eine entscheidende Rolle beim Auffinden der gesuchten Spektralfunktion.

Die Shannon-Jaynes-Entropie

Die Apriori-Wahrscheinlichkeit $P(A|H)$ beinhaltet, wie bereits erwähnt, alles vorher bekannte Wissen H über die gesuchte Spektralfunktion $A(\omega)$. Dazu gehören sowohl alle bekannten Eigenschaften als auch Informationen über die Form der Spektralfunktion, die insbesondere in die Wahl des Default-Modells $A^D(\omega)$ eingeht. Mit Hilfe der Axiome zu Lokalität, Koordinateninvarianz sowie Systemunabhängigkeit [32, 36] lässt sich eine Funktion $S(A)$ konstruieren, die die folgende Bedingung erfüllt

$$A_1 \text{ liefert ein plausibleres Bild als } A_2 \iff S(A_1) > S(A_2). \quad (3.8)$$

Diese als *Shannon-Jaynes-Entropie* bezeichnete Funktion kann nach [32] eindeutig durch folgende Ausdrücke

$$S(A) = \int_0^\infty \left[A(\omega) - A^D(\omega) - A(\omega) \ln \left(\frac{A(\omega)}{A^D(\omega)} \right) \right] d\omega \quad (3.9)$$

$$\hat{=} \sum_j \left[A(\omega_j) - A^D(\omega_j) - A(\omega_j) \ln \left(\frac{A(\omega_j)}{A^D(\omega_j)} \right) \right] \Delta\omega \quad (3.10)$$

beschrieben werden. Für die Apriori-Wahrscheinlichkeit $P(A|H)$ ergibt sich damit

$$P(A|H) = P(A|\alpha A^D) \sim e^{\alpha S(A)}, \quad (3.11)$$

wobei der reelle positive Faktor α die relative Gewichtung zwischen der Entropie und der Likelihood-Funktion herstellt. Für große Werte von α wird der Fit hauptsächlich durch das vorgegebene Default-Modell $A^D(\omega)$ beeinflusst, während sich der Fit der Spektralfunktion bei kleinen α -Werten mehr an den gemessenen Gitterdaten orientiert. Das Endresultat von MEM ist jedoch unabhängig von α , da eine Integration über diesen Parameter ausgeführt wird. Bei Fehlen jeglicher Informationen über die gemessenen Daten wird die Entropie für $A(\omega) = A^D(\omega)$ maximal.

3.1.2 Kurzbeschreibung der MEM-Prozedur

Prinzipiell existieren drei verschiedene Typen des MEM-Algorithmus, die sich jedoch lediglich in der Art des Umgangs mit dem Gewichtungsfaktor α unterscheiden. Bezüglich des Auffindens des Maximums der Posterior-Wahrscheinlichkeit $P(A|GH)$ bietet allerdings die von R. K. Bryan präsentierte Methode [38] den besten Zugang. Sie kann allgemein in drei Abschnitte aufgeteilt werden.

Suche nach der wahrscheinlichsten Spektralfunktion

Die wahrscheinlichste Spektralfunktion $\hat{A}_\alpha(\omega)$ bei gegebenem α erhält man durch die Suche nach dem Maximum von $P(A|GH) = P(A|G\alpha A^D)$. Wie man an Gleichung (3.3) leicht erkennen kann, ist dies äquivalent zur Suche nach dem Maximum von $Q \hat{=} \alpha S - \Lambda$ durch folgenden Zusammenhang:

$$\left. \frac{\delta P(A|G\alpha A^D)}{\delta A} \right|_{A=A_\alpha} \sim \left. \frac{\delta P(A|\alpha A^D) P(A|G)}{\delta A} \right|_{A=A_\alpha} = 0 \quad (3.12)$$

$$\iff (\alpha \nabla_A S - \nabla_A \Lambda)|_{A=A_\alpha} = 0 \quad (3.13)$$

mit

$$\nabla_A = \left(\frac{\partial}{\partial A_1}, \frac{\partial}{\partial A_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial A_{N_\omega}} \right) \quad (3.14)$$

sowie

$$\frac{\partial S}{\partial A_j} = -\ln \left(\frac{A(\omega_j)}{A^D(\omega_j)} \right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial A_j} = K_{ji} \frac{\partial \Lambda}{\partial F(\tau_i)}. \quad (3.15)$$

An dieser Stelle sollte allerdings auf einen kritischen Einwurf nicht verzichtet werden. Da gerade kleine Unterschiede zwischen einer Versuchs-Spektralfunktion und dem Default-Modell den Entropie-Term αS sehr klein werden lassen, beeinflusst das Default-Modell in diesem Falle sehr stark das Ergebnis der MEM-Analyse bei Vorliegen einer insuffizienten Datenqualität. Aus diesem Grund sollte das Default-Modell

lediglich zuverlässige Informationen und nicht Vermutungen über die gesuchte Spektralfunktion beinhalten, da ansonsten ein hohes Risiko einer Kontrolle des MEM-Resultats durch die eigenen „Zutaten“ besteht [37].

Da die Gesamtheit der ω_i von der Größenordnung $\mathcal{O}(1000)$ ist, folgt daraus, dass die Kern-Matrix $K_{ij} = K(\tau_i, \omega_j)$ sehr groß wird, deren Dimension allerdings mit Hilfe der sogenannten *Einzelwert-Zerlegung* substanziell reduziert werden kann. K selbst kann zunächst als Produkt $K = V\Xi U^T$ geschrieben werden, wobei V und U zwei orthogonale Matrizen und Ξ eine Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen ξ_i darstellen. Da wiederum viele der ξ_i sehr klein oder gar Null sind, kann der gesamte Raum der ursprünglichen Matrix K zum Einzelwertraum der Dimension $N_e \leq N_\tau$ nach einem bestimmten Kriterium, z.B. $\xi_{min} > 10^{-6} \xi_{max}$, reduziert werden. Die Basis dieses reduzierten Raumes wird dabei durch die ersten N_e Spalten der Matrix U gebildet, was auch zu der reduzierten $N_\omega \times N_e$ -Matrix $U^{(e)}$ und der $N_\tau \times N_e$ -Matrix $V^{(e)}$ führt. Mittels der Eigenschaft, dass die gesuchte Spektralfunktion $A(\omega)$ positiv definit sein soll, kann diese durch die Orthogonalmatrix $U^{(e)}$ und einem Vektor u aus dem Einzelwertraum in folgender Weise parametrisiert werden:

$$A(\omega_j) = A^D(\omega_j) \exp \left\{ \sum_{k=1}^{N_e} U_{jk}^{(e)} u_k \right\}. \quad (3.16)$$

Hier erkennt man den enormen Vorteil des MEM-Algorithmus, da die $N_\omega = \mathcal{O}(1000)$ -dimensional diskretisierte Spektralfunktion durch den N_e -dimensionalen Vektor u ausgedrückt werden kann. Setzt man nun die beschriebene Zerlegung von K zusammen mit Gleichung (3.16) in Gleichung (3.13) ein, so ergibt sich

$$f(u) = 0 \quad (3.17)$$

mit

$$f(u) \equiv -\alpha u - \Xi V^T \frac{\partial \Lambda}{\partial F} = -\alpha u - g. \quad (3.18)$$

Die gesuchte Nullstelle der Funktion $f(u)$ kann mit Hilfe des Standard-Newton-Verfahrens bestimmt werden. Man startet dabei bei einem willkürlichen Vektor u und erhält

$$-\frac{\partial f(u)}{\partial u} \delta u = f(u) \implies \left(\alpha \mathbb{1} + \frac{\partial g}{\partial u} \right) \delta u = -\alpha u - g, \quad (3.19)$$

wobei die Ableitung von g nach u in folgender Weise berechnet werden kann:

$$\frac{\partial g}{\partial u} \delta u = \Xi V^T \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial F^2} V \Xi U^T \text{diag}\{A\} U \quad \text{mit} \quad \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial F^2} = C^{-1}. \quad (3.20)$$

Beim Start der MEM-Analyse ist es sinnvoller, $u = 0$ zu setzen, da in diesem Fall der Start mit dem Default-Modell erfolgt (siehe Gleichung 3.16). Um einen möglichst

genauen Wert aus dem Newton-Verfahren zu erhalten, muss die Schrittgröße δu begrenzt werden. Hierzu führt man einen weiteren Hilfsparameter μ in die Formel (3.19) ein

$$\left((\alpha + \mu) \mathbb{1} + \frac{\partial g}{\partial u} \right) \delta u = -\alpha u - g, \quad (3.21)$$

so dass die Bedingung

$$\delta u^T U^t \text{diag}\{A\} U \delta u \leq \mathcal{O} \left(\sum_j A_j \right) \quad (3.22)$$

stets erfüllt ist. Die Iteration startet mit $\mu = 0$ wird anschließend dadurch fortgesetzt, dass man μ beispielsweise beginnend bei $\mu = \alpha/10000$ mit einem Faktor 10 multipliziert [32]. Solange die Bedingung aus Gleichung (3.22) erfüllt wird, ist die Schrittgröße klein genug für ein vernünftiges Update des Vektors $u' = u + \delta u$. Dieses Verfahren wird nun solange fortgesetzt, bis ein generelles Endkriterium für die Konvergenz erfüllt wird, das durch die Gleichheit der Längen der Gradienten in folgender Weise festgelegt ist:

$$\frac{2 \left| \alpha \frac{\partial S}{\partial u} - \frac{\partial \Lambda}{\partial u} \right|^2}{\left(\left| \alpha \frac{\partial S}{\partial u} \right| + \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial u} \right| \right)^2} < 10^{-5}, \quad (3.23)$$

wobei für

$$\frac{\partial S}{\partial u} = -U^T \text{diag}\{A\} U u \quad \text{und} \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial u} = U^T \text{diag}\{A\} U g \quad (3.24)$$

gelten. Ist diese Konvergenz einmal erreicht, kann der gefundene Vektor u wieder in Gleichung (3.16) eingesetzt werden, um die wahrscheinlichste Spektralfunktion $\hat{A}_\alpha(\omega)$ bei gegebenem α zu erhalten. Der numerische Aufwand kann zusätzlich weiter reduziert werden, sofern die Matrix $(\partial g / \partial u)$ in Gleichung (3.21) diagonalisiert ist. Für eine noch tiefergehende Beschreibung des gesamten Algorithmus wird an dieser Stelle auf [32, 38] verwiesen.

Mittlung über α

Die gesuchte Spektralfunktion $\bar{A}(\omega)$ ergibt sich nun endgültig als Resultat einer über α mit $P(A|GA^D)$ gewichteten Mittelung aller möglichen $\hat{A}_\alpha(\omega)$ nach

$$\begin{aligned} \bar{A}(\omega) &= \int \mathcal{D}A A(\omega) P(A|GA^D) \\ &= \int d\alpha \int \mathcal{D}A A(\omega) P(A|G\alpha A^D) P(\alpha|GA^D) \\ &\approx \int d\alpha \hat{A}_\alpha(\omega) P(\alpha|GA^D). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Hierbei wurde angenommen, dass $P(A|G\alpha A^D)$ einen scharfen Peak bei $\hat{A}_\alpha(\omega)$ besitzt, was als zulässige Näherung bei Messdaten mit kleinen Fehlern angesehen werden kann. Unter Ausnutzung der Identität

$$P(G|\alpha A^D) = \int \mathcal{D}A P(G|A\alpha A^D) P(A|\alpha A^D), \quad (3.26)$$

einer erneuten Anwendung von Bayes' Theorem und der Näherung aus Gleichung (3.25) gelangt man zu

$$\begin{aligned} P(\alpha|GA^D) &= \int \mathcal{D}A P(G|A\alpha A^D) P(A|\alpha A^D) \cdot \frac{P(\alpha|A^D)}{P(G|A^D)} \\ &\sim P(\alpha|A^D) \int \mathcal{D}A e^{Q(\alpha,A)} \end{aligned} \quad (3.27)$$

mit $Q(\alpha, A) = \alpha S(A) - \Lambda(A)$. Für $P(\alpha|A^D)$ kann eine beliebige einfache, auch konstante Funktion verwendet werden [39]. Da die numerische Integration in Gleichung (3.25) nach Konstruktion des Algorithmus über $d \log \alpha$ durchgeführt wird, ergibt sich nach $d\alpha/d \log \alpha = \alpha$ ein zusätzlicher Faktor unter dem Integral, der allerdings in unserem Fall mit $P(\alpha|A^D) = 1/\alpha$ verschwindet und hierdurch die Skaleninvarianz erhalten bleibt. Da $\hat{A}_\alpha(\omega)$ die Funktion $Q(\alpha, A)$ maximiert und $P(\alpha|GA^D)$ einen scharfen Peak um einen gewissen Wert α herum erzeugt, kann das Integral in Gleichung (3.27) durch eine Gauß-Verteilung angenähert werden [29, 40]

$$P(\alpha|GA^D) \simeq \frac{1}{\alpha} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_i \ln \left(\frac{\alpha}{\alpha + \lambda_i} \right) + Q(\alpha, \hat{A}_\alpha) \right]. \quad (3.28)$$

Die λ_i bezeichnen dabei die Eigenwerte der reellen symmetrischen Matrix

$$\Gamma_{ij} = \left. \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial A_i \partial A_j} \right|_{A=\hat{A}_\alpha}. \quad (3.29)$$

Die Funktion $Q(\alpha, \hat{A}_\alpha)$ kann nach Wahl eines Startwertes für A , der üblicherweise durch das Default-Modell gegeben ist, unter Beachtung der Bedingung $\delta A_i = A_i - (\hat{A}_\alpha)_i$ durch Suche nach dem Maximum von

$$Q(\alpha, \hat{A}_\alpha) \simeq Q(\alpha, A) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \delta A_i (\alpha \delta_{ij} + \Lambda_{ij}) \delta A_j \quad (3.30)$$

berechnet werden. Nach der Normierung von $P(\alpha|GA^D)$, so dass $\int P(\alpha|GA^D) d\alpha = 1$ ergibt, kann die gesuchte Spektralfunktion $\bar{A}(\omega)$ dann berechnet werden.

3.1.3 MEM-Fehlerbetrachtung

Die Unsicherheit in der gefundenen Spektralfunktion $A(\omega)$ ist in der zweiten Ableitung der Gleichung (3.13) enthalten und durch $(\nabla \nabla Q)^{-1} = C^{-1}$ mit der Kovarianzmatrix in Verbindung gebracht berechenbar. Da die $A(\omega)$ für aufeinanderfolgende

ω korreliert sind, kann die Fehlerbestimmung nur über den Mittelwert der Spektralfunktion bei vorgegebenem α in einer bestimmten Energieregion $I = [\omega_a, \omega_e]$ erfolgen [32]. Es gilt

$$\langle A_\alpha \rangle_I \simeq \frac{\int_I A_\alpha(\omega) d\omega}{\int_I d\omega} = \frac{\sum_{j \in I} A_\alpha(\omega_j) \Delta \omega}{(e - a + 1) \Delta \omega}. \quad (3.31)$$

Der Fehler in diesem Intervall ist dann durch die Beziehung

$$\langle (\delta A_\alpha)^2 \rangle_I \simeq - \frac{\int_{I \times I} (\nabla \nabla Q)^{-1} d\omega d\omega'}{\int_{I \times I} d\omega d\omega'} \quad (3.32)$$

gegeben, wobei man für die Kovarianzmatrix $(\nabla \nabla Q)^{-1}$ nach [38] die Gleichung

$$-(\nabla \nabla Q)^{-1} = \text{diag}\{A\} U Y \text{diag}\left\{\frac{1}{\alpha + \lambda}\right\} Y^T U^T \text{diag}\{A\}. \quad (3.33)$$

findet. Die hier auftretende Matrix Y kann leicht aus der diagonalisierten Matrix $(\partial g / \partial u)$ aus dem Newton-Verfahren abgeleitet werden. Hat man nun den Mittelwert und die Varianz für die Spektralfunktion in einer konkreten ω -Umgebung bei fixem α berechnet, so lässt sich der Fehler für die letztendlich gefundene Spektralfunktion durch einfache Integration über α analog zu Gleichung (3.25) durch

$$\langle \bar{A}_\alpha \rangle_I \simeq \int d\alpha \langle A_\alpha(\omega) \rangle_I P(\alpha | GA^D) \quad (3.34)$$

und

$$\langle (\delta A)^2 \rangle_I \simeq \int d\alpha \langle (\delta A_\alpha)^2 \rangle_I P(\alpha | GA^D) \quad (3.35)$$

ermitteln.

3.2 Monte-Carlo-Simulation

Um Erwartungswerte von Observablen auf dem Gitter berechnen zu können, müssen hochdimensionale Integrale ausgewertet werden, was im allgemeinen analytisch überhaupt nicht und numerisch mit den gängigen Integrationsmethoden nicht mehr in vertretbarer Zeit berechenbar ist. Mit Hilfe der Gibbs-Verteilung

$$P(U) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(U)}}{Z} \quad (3.36)$$

läßt sich der Erwartungswert einer Observablen \mathcal{O} schreiben als

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int \mathcal{D}U \mathcal{O}(U) P(U). \quad (3.37)$$

Ein dabei auftretendes Problem ist, daß auch auf dem Gitter unendlich viele Konfigurationen U existieren, über die integriert werden muss. Eine Lösung hierfür bieten stochastische Verfahren wie das der Monte-Carlo-Integration, das einen erwartungstreuen Schätzwert für das zu berechnende Integral in vergleichbar kurzer Zeit liefert.

Um das Integral (3.37) zu berechnen, liegt es nahe, $P(U)$ aus Gleichung (3.36) als Wahrscheinlichkeitsverteilung für eine Monte-Carlo-Integration von (3.37) zu benutzen, womit alle Zustände, die nur einen geringen Beitrag zum Erwartungswert liefern, nur entsprechend ihrer Gewichtung berücksichtigt werden und damit den numerischen Aufwand verringern (*Importance Sampling*). Allerdings enthält die Zustandssumme Z das Integral über alle Konfigurationen des Systems, das wiederum so aufwendig wie (3.37) zu berechnen und daher i.a. nicht bekannt ist. Die Ergodentheorie der statistischen Mechanik bietet jedoch eine Lösung für dieses Problem. Sie besagt nämlich, dass das Ensemblemittel einer Observable in einem System im thermodynamischen Gleichgewicht gleich ihrem zeitlichen Mittel ist, falls die Beobachtungszeit groß ist und die Dynamik des Systems es zulässt, jeden wesentlichen Zustand mit nichtverschwindender Wahrscheinlichkeit anzunehmen. Mit dieser Voraussetzung kann die gewünschte Verteilung mit Hilfe eines Markov-Prozesses erzeugt werden.

In Computersimulationen verwendet man zur Berechnung des Zeitmittels allerdings nicht die physikalische Dynamik des Systems, sondern eine „erfundene“ in der Form eines stochastischen Prozesses, dessen Eigenschaften aber die Einnahme der Verteilung (3.36) ebenfalls sicherstellen. Hierbei ist es nicht erforderlich, die Zustandssumme Z des Systems zu berechnen. Dynamik bedeutet in diesem Zusammenhang eine zeitliche Abfolge von Konfigurationen $\{U_i\}$ mit $i = 0, 1, \dots$. Man betrachtet dabei Prozesse, bei denen Übergänge zwischen den abzählbar vielen Zuständen $\{S_i\}$ eines Systems zu diskreten Zeiten passieren. Man spricht dabei von einer *Markov-Kette*, wenn die Verteilung eines Zustandes X_t des Systems zum Zeitpunkt t von allen vorangegangenen unabhängig ist außer dem unmittelbaren Vorgänger X_{t-1} . Für eine Markov-Kette gilt somit:

$$P(S_i \rightarrow S_j) := P(X_t = S_j | X_{t-1} = S_i) \quad (3.38)$$

$$= P(X_t = S_j | X_{t-1} = S_{i-1}, \dots, X_1 = S_i). \quad (3.39)$$

Eine Markov-Kette heißt *ergodisch*, wenn jeder Zustand von jedem Zustand mit nichtverschwindender Wahrscheinlichkeit angenommen werden kann,

$$P(S_i \rightarrow S_j) > 0 \quad \forall i, j. \quad (3.40)$$

Entscheidend ist jedoch, dass die Markov-Kette die gewünschte Verteilung (3.36) annimmt. Eine hinreichende Bedingung dafür ist die *Detailed Balance*

$$P(U_i)P(U_i \rightarrow U_j) = P(U_j \rightarrow U_i)P(U_j) \quad \forall i, j. \quad (3.41)$$

Zusammen mit (3.36) lässt sich dies reduzieren auf

$$e^{-\beta\mathcal{H}(U_i)} P(U_i \rightarrow U_j) = P(U_j \rightarrow U_i) e^{-\beta\mathcal{H}(U_j)} \quad \forall i, j, \quad (3.42)$$

wobei die Zustandssumme Z nicht mehr auftaucht. Das gesamte Problem wird demnach darauf zurückgeführt, die Übergangswahrscheinlichkeiten $P(U_i \rightarrow U_j)$ zu finden, die (3.42) erfüllen. Ist dies geschehen und die Konfigurationen besitzen die gewünschte Verteilung, das System also *thermalisiert*, kann nun das Integral (3.37) geschätzt werden, indem man

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(U) \quad (3.43)$$

berechnet. Man kann zahlreiche Algorithmen finden, die dieses leisten. Die meisten dieser Algorithmen basieren auf *lokalen Updates*, bei denen jeweils nur ein einziger Link verändert wird. Durch einen *Sweep*, d.h. durch das Ausführen des lokalen Updates nacheinander an jedem Link des Gitters, gewinnt man eine neue Konfiguration, so dass dabei sowohl Ergodizität als auch Detailed Balance gewährleistet sind [41]. Der für diese Arbeit verwendete Algorithmus soll nun kurz vorgestellt werden.

3.3 Der Wolff-Cluster-Algorithmus

Im Jahre 1987 entwickelten Swendsen und Wang einen Monte-Carlo-Algorithmus für Spin-Modelle, den Wolff 1989 noch ein wenig verbesserte [42]. Dieser *Wolff-Cluster-Algorithmus* basiert dabei auf der Idee, dass eine bestehende Konfiguration in eine neue überführt wird, indem viele Spins gleichzeitig verändert werden. Dabei sollte sich diese neue Konfiguration möglichst merklich von der alten unterscheiden.

Bei einer Simulation eines $O(N)$ -System nahe dem kritischen Punkt bilden sich Spinblöcke, sogenannte Cluster, aus, in denen die einzelnen Spins über viele Größenordnungen hinweg gleich ausgerichtet sind. Gelingt es nun, einen solchen Cluster ohne eine wesentlich Energieänderung des Systems in eine neue Richtung zu drehen, dann kann auf diese Weise in relativ kurzer Zeit eine neue Konfiguration des Systems erzeugt werden, die mit der alten Konfiguration nicht so stark korreliert ist. Hierin steckt ein großer Vorteil gegenüber den oben beschriebenen lokalen Updates.

Ausgehend von der vom Isingmodell bekannten Spinflip-Operation ($\mathbf{s}_i \rightarrow -\mathbf{s}_i$) kann der Wolff-Cluster-Algorithmus als Verallgemeinerung dieses Prozesses für das $O(N)$ -Modell betrachtet werden. Dabei wird ein einzelner Spin \mathbf{s}_i an einer zu einem beliebigen N -dimensionalen Einheitsvektor \mathbf{r} orthogonalen Hyperfläche gespiegelt, wobei sich der neue Spin \mathbf{s}'_i durch die Anwendung des Operators $R(\mathbf{r})$ auf den alten nach

$$\mathbf{s}'_i = R(\mathbf{r}) \mathbf{s}_i = \mathbf{s}_i - 2(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r}. \quad (3.44)$$

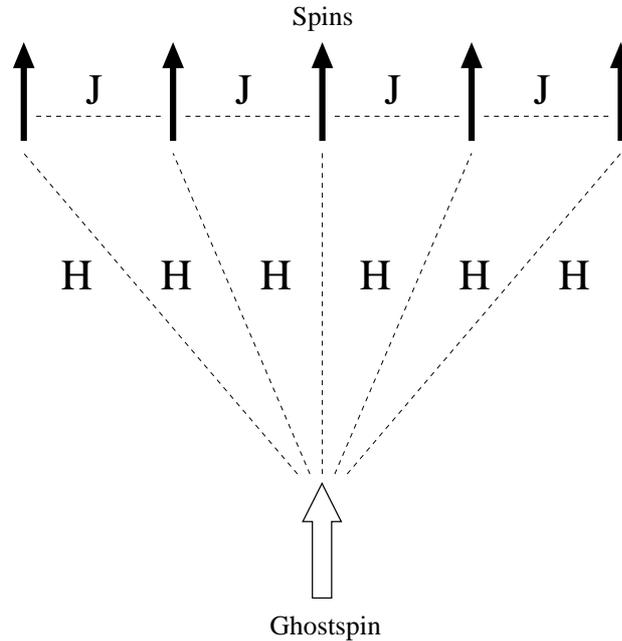


Abbildung 3.1: Kopplung der Spins untereinander und mit dem Ghostspin.

ergibt. Die in Kapitel 1.1 definierte Wirkung für $O(N)$ -Spinmodelle (1.1) ist invariant unter solchen globalen $R(\mathbf{r})$ -Transformationen, denn es gilt

$$(R(\mathbf{r}) \mathbf{s}_i) (R(\mathbf{r}) \mathbf{s}_j) = \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j. \quad (3.45)$$

Das äußere Feld \mathbf{H} kann ebenfalls in diesen Algorithmus in der folgenden Weise integriert werden. Da jeder einzelne Spin mit der Stärke J an seine direkten Nachbarn koppelt, wird nun zur Verkörperung des magnetisierenden Feldes ein sogenannter *Ghostspin* \mathbf{S}_{Ghost} eingeführt. Dieser Ghostspin stellt für jeden einzelnen Spin auf dem Gitter einen unmittelbaren Nachbarn dar, wobei die Kopplung mit ihm statt J nun den Wert H annimmt. Die Abbildung 3.1 zeigt eine vereinfachte Darstellung dieses Zusammenhangs.

Der Wolff-Cluster-Algorithmus kann für ein $O(N)$ -Modell mit äußerem Feld in folgender Schrittweise beschrieben werden:

- Zunächst wird ein beliebiger N -dimensionaler Einheitsvektor \mathbf{r} gewählt.
- Dann wählt man einen beliebigen Startspin \mathbf{s}_x an der Stelle x im Gitter der Größe $V = L^d$ als ersten Spin des entstehenden Clusters.
- Daraufhin werden dessen Nachbarspins \mathbf{s}_y betrachtet und mit der Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P(\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y) &= 1 - e^{\min[0, J R(\mathbf{r}) \mathbf{s}_x (1 - R(\mathbf{r})) \mathbf{s}_y]} \\ &= 1 - e^{\min[0, -2J (\mathbf{r} \mathbf{s}_x) (\mathbf{r} \mathbf{s}_y)]} \end{aligned} \quad (3.46)$$

in den Cluster aufgenommen.

- Dieser Schritt wird nun für alle Nachbarn der aufgenommenen Spins wiederholt, wobei jeder Spin des Gitters nur einmal die Möglichkeit hat, dem Cluster zugefügt zu werden. Sobald keine neuen Spins mehr hinzukommen, ist dieser Schritt beendet.
- Auch der Ghostspin kann als Nachbar von allen Spins mit der Wahrscheinlichkeit

$$P(\mathbf{s}_x, \mathbf{S}_{Ghost}) = 1 - e^{\min[0, -2H(\mathbf{r}\mathbf{s}_x)(\mathbf{r}\mathbf{S}_{Ghost})]} \quad (3.47)$$

in den Cluster aufgenommen werden.

- Abschließend werden alle Spins des Cluster (evtl. auch der Ghostspin) an der zu \mathbf{r} orthogonalen Hyperfläche mit der Vorschrift (3.44) gespiegelt.

Dieser Algorithmus erfüllt sowohl die Ergodenhypothese, denn jeder beliebige Zustand des Systems kann mit höchstens L^d Updates erzeugt werden, als auch die Bedingung *Detailed Balance*.

3.4 Die Jackknife-Fehleranalyse

Die Schätzfunktion einer Observablen, die durch einen funktionalen Zusammenhang aus einer oder mehreren Messgrößen gewonnen wird, besitzt einen verzerrten Erwartungswert. Die *Jackknife-Methode* berücksichtigt diesen Umstand, indem sie gegenüber dem naiven Mittelwert eine verbesserte Schätzung einer solchen Observablen \mathcal{O} und eine Schätzung des Fehlers liefert. Sie hebt praktisch die Verzerrung fast vollständig auf und gibt eine erwartungstreue Schätzung für diese Observable an. Man unterteilt dazu die gewonnenen Daten in N gleichlange Blöcke, aus denen man dann N reduzierte Datensätze zusammenstellt, indem man in jedem Datensatz einen der N Blöcke vernachlässigt.

Sei T der Mittelwert einer Observablen \mathcal{O} auf den Ausgangsdaten und T_i der auf dem i -ten reduzierten Datensatz, so erhält man als verbesserte Schätzung des Erwartungswerts und des Fehlers durch

$$\bar{\mathcal{O}} \approx \bar{J} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N J_i \quad (3.48)$$

$$\Delta\mathcal{O} \approx \sqrt{\frac{\sum_i (J_i - \bar{J})^2}{N(N-1)}} \quad (3.49)$$

mit

$$J_i = NT - (N - 1)T_i. \quad (3.50)$$

Die Methode läßt sich immer dann sinnvoll anwenden, wenn die Anzahl der Daten nicht zu klein ist, sofern man bei der Wahl der Blockanzahl N berücksichtigt, daß die Blocklänge größer als die Autokorrelationszeit ist, um den Fehler der jeweiligen Observablen nicht zu unterschätzen.

Kapitel 4

Resultate und Auswertung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen des $O(4)$ -Spinmodells sowie die Resultate der MEM-Analyse ausgewertet und analysiert. Die Simulationen des $O(4)$ -Spinmodells wurden mittels eines Fortran-90-Programms, basierend auf dem von L. Fromme und M. Seniuch für ihre Diplomarbeiten [13] und [18] verwendeten $O(4)$ -Programms, auf insgesamt 28 PCs des PC-Clusters der theoretischen Physik in Bielefeld durchgeführt, wobei jeder PC mit zwei Dualcore Intel Xeon Prozessoren mit 2.6 GHz bzw. 3.0 GHz ausgestattet ist und über 1024 MB bzw. 8 GB RAM verfügt. Für die Auswertung der $O(4)$ -Daten wurde ein ebenfalls von L. Fromme und M. Seniuch entwickeltes Auswertungsprogramm benutzt, das die gemessenen Observablen einer Jackknife-Fehleranalyse mit zwanzig Blöcken unterzog. Zur Extraktion der Spektralfunktionen aus den gemessenen Korrelationen des $O(4)$ -Spinmodells wurde im zweiten Schritt ein von I. Wetzorke für ihre Dissertation [43] entwickeltes C-Programm zur Maximum Entropie Methode als Grundlage verwendet, das zusätzlich leicht modifiziert wurde.

4.1 Messmethode und verwendete Parameter

Alle Daten des $O(4)$ -Spinmodells wurden auf einem dreidimensionalen kubischen Gitter mit periodischen Randbedingungen und der linearen Ausdehnungen von $L = 120$ Gittereinheiten erzeugt. Das zur Simulation verwendete Fortran-90-Programm gibt neben der durchschnittlich gebildeten Clustergröße pro Iteration jeweils als Messwerte die Energiedichte des Systems, das Gittermittel der longitudinalen Spin-Komponente s^{\parallel} und das Gittermittel des transversalen Spinvektors $|\mathbf{s}^{\perp}|$ aus. Darüber hinaus wurden die nicht-zusammenhängenden Korrelationsfunktionen $\langle S^{\parallel}(0) S^{\parallel}(\tau) \rangle$ und $\langle \mathbf{S}^{\perp}(0) \mathbf{S}^{\perp}(\tau) \rangle$ der Ebenenspins für die Abstände $\tau = 0, 1, \dots, L/2$ ausgegeben.

Für diese Observablen erfolgte die Ausgabe allerdings nur als Mittelwert über jeweils 500 Iterationen, um erheblich Speicherplatz zu sparen. Die für diese Arbeit benötigten Observablen wie die Magnetisierung M und die Suszeptibilitäten χ_L und χ_T konnten aus diesen Messgrößen berechnet werden. Der für die Erzeugung der $O(4)$ -Korrelationen verwendete Parameterbereich des äußeren Feldes H ist für jede einzelne Kopplung in Tabelle 4.1 dargestellt.

J	H
0.85	0.0001 - 0.007
0.90	0.0001 - 0.007
0.91	0.0001 - 0.007
0.92	0.00001 - 0.007
0.93	0.0001 - 0.007
0.9359	0.00001 - 0.007
0.94	0.0001 - 0.007
0.95	0.00001 - 0.007
0.97	0.0001 - 0.007
1.00	0.0001 - 0.007
1.20	0.0001 - 0.007

Tabelle 4.1: Simulationsbereiche für die einzelnen Kopplungen J .

Bei festgelegter Kopplung $J = 1/T$ und äußerem Feld H wurden die Daten mit einer Statistik von jeweils 100000 Messungen erzeugt. Beim Start der jeweiligen Simulation wurde beginnend mit einer zufälligen, ungeordneten Konfiguration zunächst eine je nach Kopplung unterschiedlich lange Thermalisierung des Systems durchgeführt, bevor mit den eigentlichen Messungen der Observablen begonnen wurde. Je nach Kopplung und äußerem Feld variierte die Anzahl der Thermalisierungsschritte zwischen 10000 und 25000. Zwischen den einzelnen Messungen wurde die Anzahl der Cluster-Updates in Anlehnung an frühere Untersuchungen jeweils so variiert, daß die Autokorrelation für die Magnetisierung und die Energie kleiner als fünf war, um möglichst unkorrelierte Daten zu erhalten [13]. Im Falle für $J > J_c$, aber auch generell bei großem äußerem Feld H , kann ein Spincluster eine beträchtliche Größe annehmen und bis zu 25% des gesamten Gittervolumens einnehmen, so dass zwischen einzelnen Messungen im Schnitt nur 200 Updates nötig waren. Für Kopplungen unterhalb der kritischen Kopplung allerdings, also $J < J_c$, und $H \gtrsim 0$ mussten deutlich mehr Updates (ca. 1000) zwischen den einzelnen Messungen durchgeführt werden, um eine weitgehend unabhängige Konfiguration zu erzeugen, da die gebildeten Cluster hier sehr klein sind.

Die für die Analyse der Daten benötigten Parameter des dreidimensionalen $O(4)$ -Spinmodells stammen aus [6] und wurden in Tabelle 4.2 zur Übersicht gebracht. Alle

Werte für die kritischen Exponenten, die kritische Kopplung J_c und die Normierungen T_0 und H_0 wurden in allen auftretenden Gleichungen sowie bei allen späteren Fits als Konstanten betrachtet, wobei mögliche Fehler in diesen Parametern außer acht gelassen wurden.

β	δ	γ	ν	ν_c	J_c	T_0	H_0
0.380	4.824	1.4531	0.7377	0.4024	0.93590	1.093	4.845

Tabelle 4.2: Verwendete Parameter für das dreidimensionale O(4)-Modell.

Die mittels des O(4)-Programms jeweils als Mittelwert über 500 Iterationen erzeugten Korrelationsfunktionen $\langle S^{\parallel}(0) S^{\parallel}(\tau) \rangle$ und $\langle \mathbf{S}^{\perp}(0) \mathbf{S}^{\perp}(\tau) \rangle$ für die Abstände $\tau = 0, 1, \dots, 60$ wurden gemäß den Gleichungen (1.28) und (1.29) separat für den transversalen und den longitudinalen Kanal dem MEM-Programm zur Datenanalyse übergeben. Darüber hinaus wurde bei der MEM-Analyse als Inputparameter für die Spektralfunktion $A(\omega)$ neben dem Default-Modell, auf das bereits in Kapitel 2.4 näher eingegangen wurde, eine Diskretisierungstiefe von $\Delta\omega = 10^{-3}$ gewählt.

4.2 Verhalten des Ordnungsparameters M

Zunächst soll an dieser Stelle eine Untersuchung des Ordnungsparameters des O(4)-Spinmodells, also der Magnetisierung M , erfolgen, da dessen Verhalten in den einzelnen Temperaturbereichen für die Analyse des transversalen und longitudinalen Spektrums von entscheidender Bedeutung ist. Darüber hinaus lassen sich durch das Verhalten der Magnetisierung im Bereich kleiner äußerer Felder H bereits Rückschlüsse auf den möglichen Einfluss von Finite-Size-Effekten oder einer zu geringen Anzahl von Clusterupdates für die Messungen ziehen. Die für die jeweiligen Kopplungen und äußeren Felder ermittelten Werte der Magnetisierung sind in den Tabellen A.1, A.2 und A.3 des Anhangs aufgelistet.

In der gebrochenen Phase, also für $T < T_c$ bzw. $J > J_c$, erwartet man nach der in Gleichung (1.55) gefundenen Beziehung für kleine äußere Felder

$$M(T < T_c, H) = M(T, 0) + c_1(T)H^{\frac{1}{2}} + \dots$$

eine $H^{1/2}$ -Abhängigkeit der Magnetisierung vom äußeren Feld H . Zu diesem Zweck wurden die gemessenen Mittelwerte der Magnetisierung für jede einzelne Kopplung $J > J_c$ über der Quadratwurzel des Magnetfeldes aufgetragen.

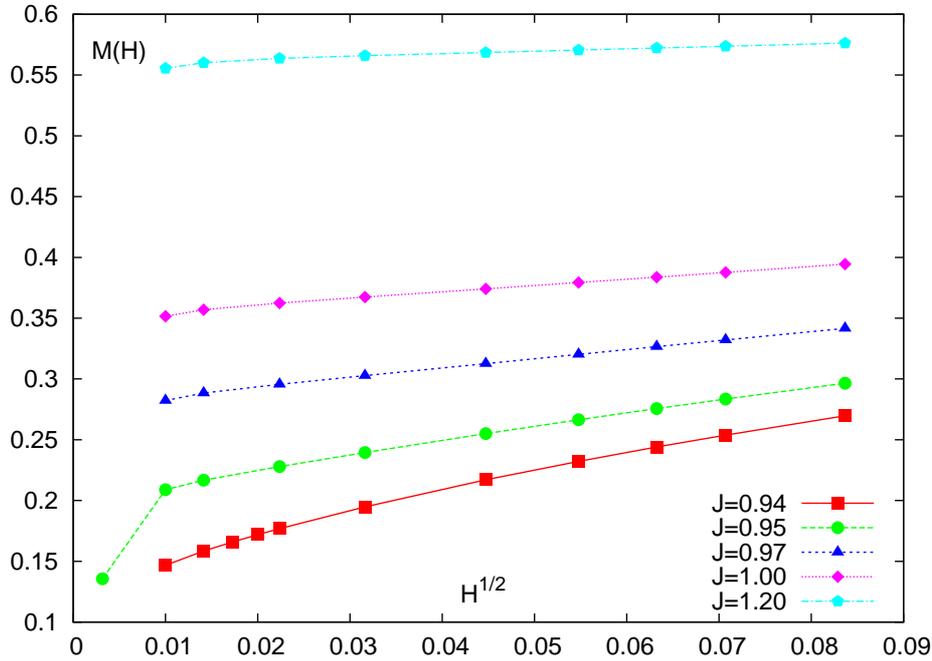


Abbildung 4.1: Die Magnetisierung M als Funktion des äußeren Feldes H für $J > J_c$.

Abbildung 4.1 zeigt das Verhalten über den gesamten von uns gewählten Bereich des äußeren Feldes. Es ist bei allen aufgetragenen Kopplungen deutlich der Goldstone-Effekt zu erkennen, wonach für verschwindendes äußeres Feld eine spontane Magnetisierung $M(T, 0)$ im System verbleibt. Für die Kopplung $J = 0.94$, die der kritischen Kopplung am nächsten liegt, lässt sich eine deutliche Abweichung vom vorhergesagten Verhalten erkennen. Dies kann auf die Tatsache zurück geführt werden, dass wir uns noch im näheren Umfeld der kritischen Kopplung und damit des Phasenübergangs befinden, wodurch noch dessen Einflüsse auf den Ordnungsparameter zu erkennen sind. Für die kritische Kopplung findet man nämlich, wie später gezeigt wird, eine von $H^{1/2}$ verschiedene Abhängigkeit der Magnetisierung. Für größere Kopplungen und insbesondere ab einem Feld von $H = 0.0002$ erkennt man für die Magnetisierung hingegen das erwartete Verhalten, wobei allerdings auffällt, dass die Kurven beim Übergang zu $H = 10^{-4}$ eine leichte Abweichung vom Verlauf einer Geraden zeigen. Bei $J = 0.95$ und $H = 10^{-5}$ liegt der gemessene Wert für die Magnetisierung unverkennbar zu tief. Diese Abweichungen rühren von Finite-Size-Effekten her. In [4] wurden diese Effekte auf verschiedenen kleineren Gittern mit $L = 24 - 96$ bereits ausführlich untersucht.

Außerdem wurden dort und in [6] Untersuchungen zum Verhalten der Magnetisierung auf der kritischen Linie, also bei $J = J_c$, durchgeführt. Dabei wurde die durch

das Skalenverhalten der Magnetisierung in Gleichung (1.43) gefundene Beziehung

$$M(T_c, H) = B^c H^{\frac{1}{\delta}} \quad (4.1)$$

untersucht. Sie fanden für die Amplitude $B^c = 0.721(2)$ und für den kritischen Exponenten $\delta = 4.824(9)$. Da wir für unsere Simulationen am kritischen Punkt eine deutlich höhere Statistik auf einem größeren Gitter vorweisen können, führten wir einen neuen Fit durch, um eine Verbesserung der beiden Werte zu erreichen. Zu diesem Zweck wurde die Magnetisierung auf einer doppellogarithmischen Skala über dem äußeren Feld aufgetragen und anschließend ein Geradenfit für den Bereich $H = [0.0001, 0.007]$ durchgeführt. Als Resultate für die Amplitude und den Exponenten ergaben sich die Werte

$$B^c = 0.723(2) \quad \text{und} \quad \delta = 4.816(6) \quad (4.2)$$

mit $\chi^2/dof \approx 1.1$. Diese Resultate stimmen mit den in [6] gefundenen Werten innerhalb des Fehlerbalkens überein. Dennoch bleibt festzuhalten, dass das von uns gefundene Resultat für den kritischen Exponenten δ etwas näher an den Wert 4.789(6) aus [25] herangerückt ist, der allerdings auch aus Berechnungen bei verschwindendem äußeren Feld abgeleitet wurde. Der kleinste Wert des äußeren Feldes bei $H = 10^{-5}$ wurde in den Fit nicht mit einbezogen, da auch in diesem Falle durch vorherige Analyse Finite-Size-Effekte vermutet werden. Das Verhalten der Magnetisierung als Funktion des äußeren Feldes ist zusammen mit dem Fit-Ergebnis in Abbildung 4.2 gezeigt. Es ist leicht zu erkennen, dass die mit den berechneten Werten geplottete Funktion aus Gleichung (4.1) die gemessenen Datenpunkte für die Magnetisierung für den gesamten Bereich des äußeren Feldes sehr gut repräsentiert und damit die gefundene Magnetfeld-Abhängigkeit der Magnetisierung aus Gleichung (1.43) für $J = J_c$ bestätigt. Lediglich bei $H = 10^{-5}$ kann aufgrund des bereits erwähnten Finite-Size-Effekts keine Übereinstimmung gefunden werden.

Auch in der symmetrischen Phase ($J < J_c$ bzw. $T > T_c$) kann für die Abhängigkeit der Magnetisierung vom äußeren Feld eine charakteristische Beziehung gefunden werden. Es müsste sich, wie bereits in [4] gezeigt, für kleine Felder H

$$M(T > T_c, H) \sim H$$

ein linearer Zusammenhang ergeben, der mit sinkender Kopplungsstärke, also zunehmender Temperatur, auch immer mehr für größere Magnetfelder Gültigkeit erlangen sollte. In Abbildung 4.3 wurden die Daten der Magnetisierung wieder über dem gesamten von uns gewählten Bereich des äußeren Feldes aufgetragen. Es zeigt sich, dass für alle Kopplungen die Magnetisierung qualitativ dem vorausberechneten Verhalten für kleine äußere Felder folgt. Mit abnehmender Kopplungsstärke ist eine lineare Abhängigkeit vom äußeren Feld auch für größer werdende Felder gut zu erkennen, wobei sich bei der niedrigsten Kopplung $J = 0.85$ bereits ein linearer

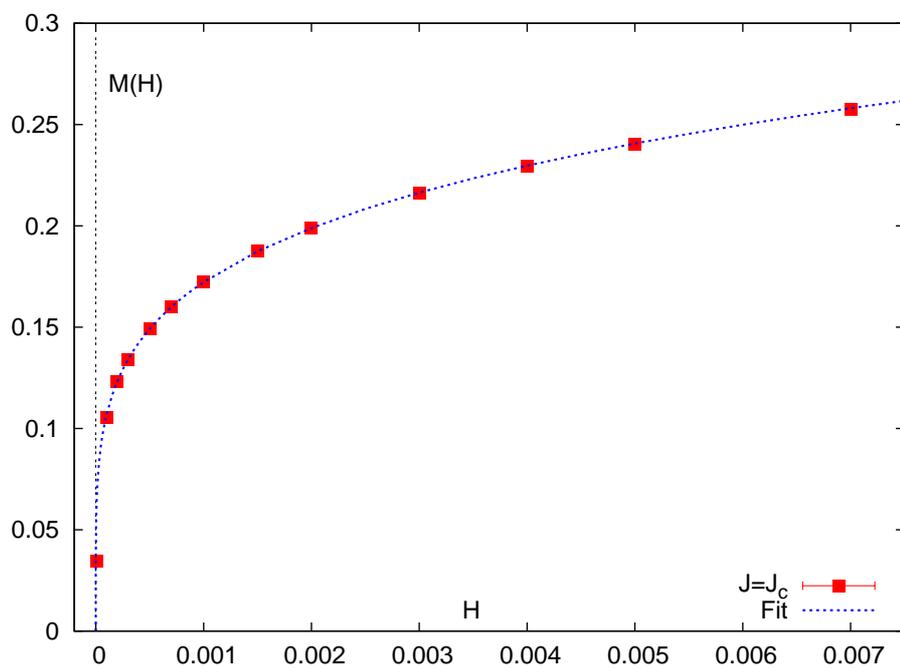


Abbildung 4.2: Die Magnetisierung M als Funktion des äußeren Feldes H für $J = J_c$. Die gestrichelte Linie zeigt dabei das Fit-Ergebnis (4.2) für Gleichung (4.1).

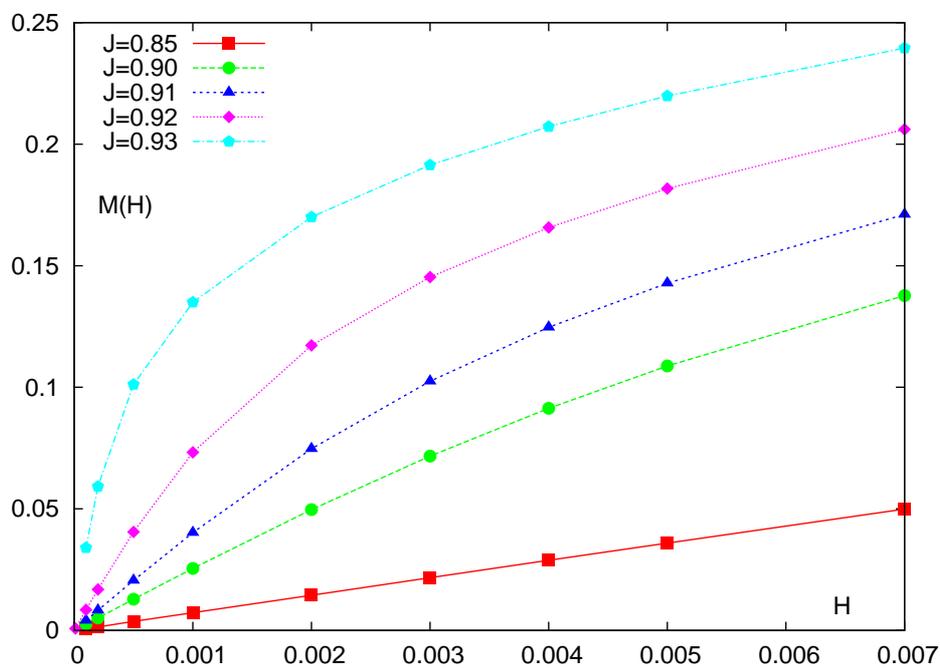


Abbildung 4.3: Die Magnetisierung M als Funktion des äußeren Feldes H für $J < J_c$.

Zusammenhang für den kompletten Magnetfeldbereich ergibt. Für das kleinste Feld $H = 10^{-5}$ bei $J = 0.92$ ist erneut eine deutliche Abweichungen erkennbar, da hier der Wert der Magnetisierung deutlich zu hoch liegt. Diese Abweichung kann wiederum auf den Einfluss von Finite-Size-Effekten zurück geführt, aber auch der Tatsache zugeordnet werden, dass im Bereich solch kleiner Magnetfelder in der symmetrischen Phase eine beträchtliche Unordnung des Systems besteht, die natürlich zu höheren Schwankungen des Ordnungsparameters M führt. Möglicherweise war die von uns gewählte Anzahl an Clusterupdates zwischen den einzelnen Messungen zu niedrig.

Bei der Kopplung $J = 0.85$ konnten wir zudem unabhängig vom äußeren Feld merkbare Abweichung des Quotienten $\chi_T = M/H$ von der Summe $\chi_T = \sum G_T(\tau)$ feststellen. Die Abweichungen liegen zwischen 5 und 6% und damit außerhalb des Fehlerbereiches. Als Ursache konnte ein zu niedriger Messwert der Magnetisierung gefunden werden. Einen Grund hierfür liefert die Tatsache, dass bei den in diesem Temperaturregime vorkommenden winzig kleinen Clustern die von uns gewählte Anzahl von Clusterupdates zwischen den einzelnen Messungen offensichtlich noch zu gering angesetzt wurde, womit die Messergebnisse zu stark korreliert sind. Im Rahmen unserer quantitativen Analyse haben wir uns daher entschlossen, die Messwerte für die Kopplung $J = 0.85$ für zukünftige Auswertungen außer Acht zu lassen.

4.3 Das transversale Spektrum

4.3.1 Spektralfunktionen im transversalen Kanal

Zunächst sollen die mittels MEM extrahierten transversalen Spektralfunktionen gezeigt und deren Verlauf qualitativ beschrieben werden. Da die als Default-Modell (2.50) für das transversale Spektrum gefundene δ -Funktion nicht numerisch ausgewertet werden kann, wurde von uns eine Näherung mit Hilfe der Breit-Wigner-Formel

$$\delta(\omega - m_T) \approx \frac{1}{2\pi} \frac{\varepsilon}{(\omega - m_T)^2 + (\varepsilon/2)^2} \quad (4.3)$$

gewählt, wobei ε die Halbwertsbreite angibt und von uns mit $\varepsilon = 0.01$ festgesetzt wurde. Der Referenzwert für die transversale Masse, der in das Default-Modell eingeht, wurde mit Hilfe von Gleichung (2.10) und dem Ansatz für die Stiffness $c_s = 1$ bestimmt.

Es findet sich, dass bei allen von uns gewählten Kopplungen J sowohl in der symmetrischen als auch in der gebrochen Phase und auf der kritischen Isotherme das

transversale Spektrum genau einen scharfen Peak besitzt, dessen Position im folgenden als transversale Masse m_T bezeichnet wird. Die aus den Spektralfunktionen durch eine gewichtete Mittlung mit der Trapezregel

$$m_T = \bar{\omega} = \frac{\sum_i \omega_i A(\omega_i)}{\sum_i A(\omega_i)} \quad (4.4)$$

ermittelten transversalen Massen sind in den Tabellen A.7, A.8 und A.9 des Anhangs aufgelistet. Beispielhaft für alle anderen Kopplungen ist eine Darstellung der transversalen Spektralfunktion $A_T(\omega)$ in den beiden Phasen und auf der kritischen Isotherme für $J = 0.92$, $J = J_c = 0.9359$ und $J = 0.95$ in den Abbildungen 4.4, 4.5 und 4.7 zu sehen. Dabei wurde nur jeweils der Bereich geplottet, bei dem die Spektralfunktion von Null verschieden ist.

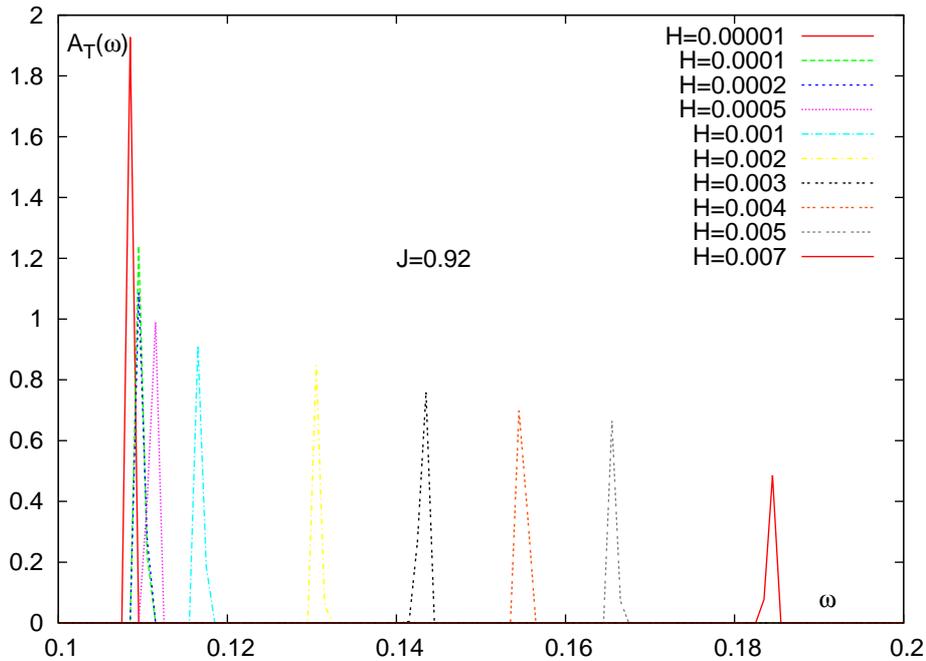


Abbildung 4.4: Die transversale Spektralfunktion $A_T(\omega)$ für $J = 0.92$.

Es zeigt sich zunächst bei allen drei Kopplungen ein analoges Verhalten, demnach die Peaks für größer werdendes äußeres Feld H stetig an Höhe verlieren, gleichzeitig allerdings, was in den Abbildungen nicht erkennbar ist, aber aus den reinen Spektraldaten ablesbar ist, eine geringfügig größere Halbwertsbreite erlangen. Des weiteren ist durch einen Vergleich bei allen, auch bei den hier nicht gezeigten, Kopplungen zu sehen, dass die Peakhöhen generell mit sinkender Kopplungsstärke J ebenfalls niedriger ausfallen. Durch die Diskretisierung der Spektralfunktionen innerhalb des MEM-Algorithmus auf $\Delta\omega = 10^{-3}$ ergibt sich ebenfalls ein Einfluss auf die Peakhöhe, da

einerseits der Fall auftreten kann, dass das tatsächliche Energieniveau auch exakt getroffen wird, andererseits aber möglicherweise auch knapp verfehlt wird, da sie sich zwischen zwei aufeinander folgenden ω -Werten befindet. Auf eine quantitative Analyse der Peakhöhen wurde aus diesem Grunde verzichtet, zumal lediglich die Lage des Peaks auf der Energieskala für die Extraktion der transversalen Masse von Interesse ist.

Abbildung 4.4 zeigt am Beispiel der Kopplung $J = 0.92$ das Verhalten für die symmetrische Phase des Modells. Man erkennt sehr schön die für kleine Magnetfelder und bereits in Abbildung 4.3 gezeigte lineare Abhängigkeit der Magnetisierung M vom äußeren Feld H , die zu einer konstanten transversalen Masse führt. Tatsächlich liegen die Peaks für sehr kleine äußere Felder sehr nahe beisammen und laufen erst mit zunehmendem äußeren Feld zu höheren Energien auseinander. Diesen Effekt kann man in Analogie zu Abbildung 4.3 bei noch niedrigeren Kopplungen immer deutlicher erkennen, so dass beispielsweise bei der von uns analysierten niedrigsten Kopplung $J = 0.90$ nahezu sämtliche Massenpeaks unabhängig von H aufeinander liegen. Dies entspricht auch dem für den gesamten Bereich des äußeren Feldes festgestellten linearen Zusammenhang zwischen H und M bei dieser Kopplung (siehe Abbildung 4.3).

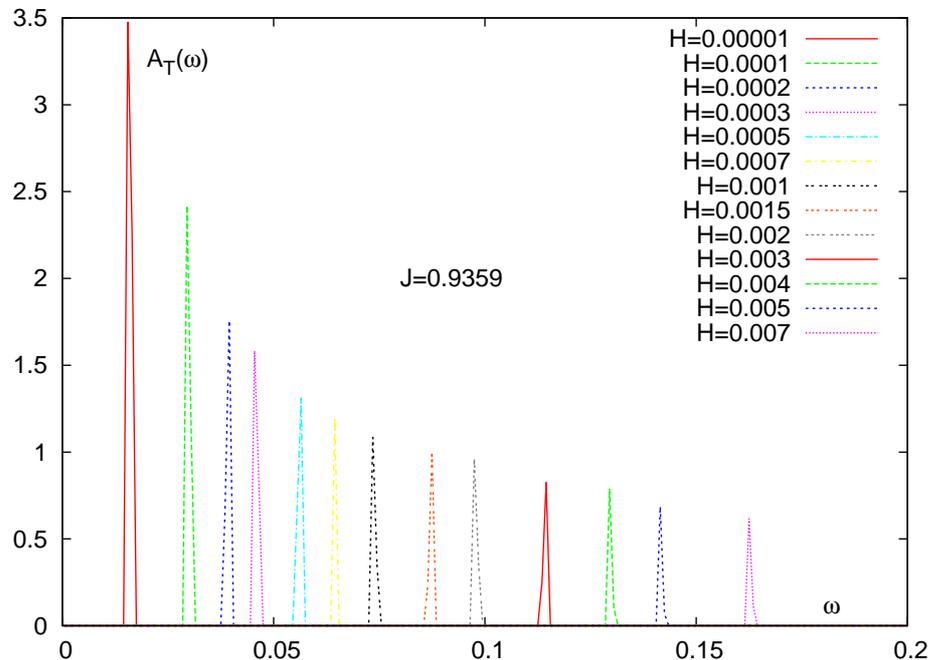


Abbildung 4.5: Die transversale Spektralfunktion $A_T(\omega)$ für $J = J_c = 0.9359$.

Das transversale Spektrum für die kritische Isotherme ($J = 0.9359$) ist in Abbildung 4.5 dargestellt. Im Gegensatz zur symmetrischen Phase liegen die Peaks für

die kleinsten äußeren Felder näher bei Null. Diese Beobachtung befindet sich in guter Übereinstimmung mit der Tatsache, dass die transversale Masse nach Gleichung (1.81) mit dem Inversen der transversalen Korrelationslänge identifiziert werden kann und diese auf der kritischen Kopplung für $H \rightarrow 0$ gemäß Gleichung (1.48) divergiert, so dass die transversale Masse für verschwindendes äußeres Feld gegen Null streben muss.

Es lohnt an dieser Stelle, das Verhalten der transversalen Masse m_T am kritischen Punkt in Abhängigkeit vom äußeren Feld H genauer zu untersuchen, um daraus einen weiteren kritischen Exponenten für das dreidimensionale $O(4)$ -Spinmodell bestimmen zu können. Nach Gleichung (1.48) erhält man für das Verhalten der transversalen Masse m_T am kritischen Punkt

$$m_T = \frac{H^{\nu_c}}{\xi_T^c}. \quad (4.5)$$

Trägt man diesen Zusammenhang über einer doppellogarithmischen Skala auf, so lassen sich leicht mittels eines Geradenfits der kritische Exponent ν_c und die kritische Amplitude ξ_T^c bestimmen.

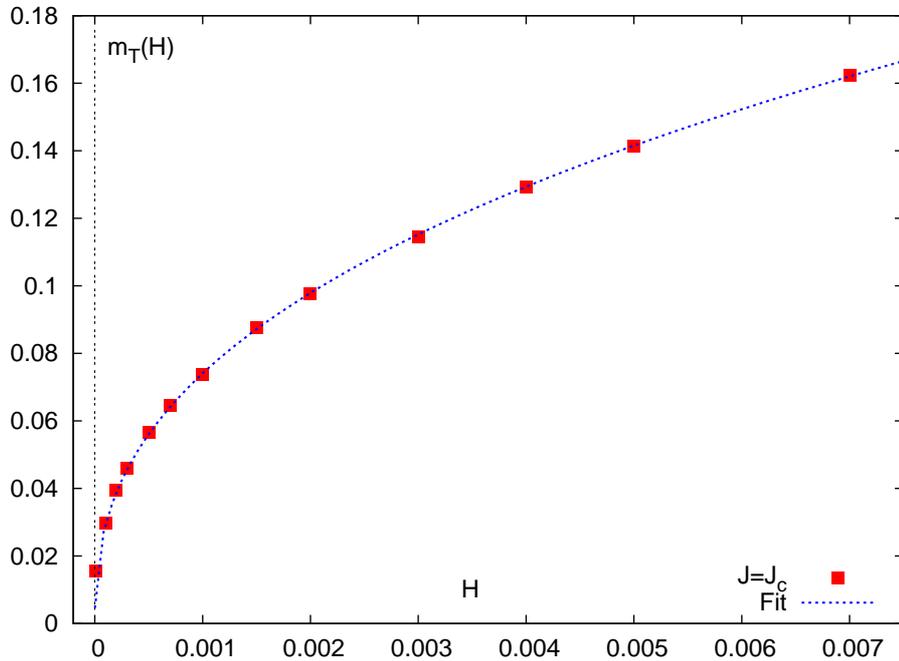


Abbildung 4.6: Die transversale Masse m_T als Funktion des äußeren Feldes H für $J = J_c$. Die gestrichelte Linie zeigt dabei das Fit-Ergebnis (4.6) für Gleichung (4.5).

Zu diesem Zweck wurden die Messwerte für die transversale Masse im Bereich $H =$

[0.0001, 0.007] verwendet und wie schon in Kapitel 4.2 der kleinste Wert bei $H = 10^{-5}$ wegen der vermuteten Finite-Size-Effekte nicht mit in den Fit einbezogen. Als Resultate ergaben sich für die Amplitude und den Exponenten die Werte

$$\xi_T^c = 0.8380(12) \quad \text{und} \quad \nu_c = 0.4024(2) \quad (4.6)$$

mit $\chi^2/dof \approx 0.93$. Mit diesem Resultat und dem Ergebnis der Berechnung des kritischen Exponenten δ aus (4.2) lassen sich nun über die Skalenrelationen (1.50) alle anderen kritischen Exponenten für das dreidimensionale O(4)-Spinmodell berechnen. Das untersuchte Verhalten der transversalen Masse als Funktion des äußeren Feldes am kritischen Punkt ist zusammen mit diesem Fit-Ergebnis in Abbildung 4.6 dargestellt. Wie deutlich zu erkennen ist, werden die Datenpunkte für das Verhalten der transversalen Masse durch die mit den berechneten Werten geplottete Funktion aus Gleichung (4.5) für den gesamten Bereich des äußeren Feldes sehr gut repräsentiert. Darüber hinaus kann festgehalten werden, dass die von uns gefundenen Resultate für den kritischen Exponenten ν_c und für die kritische Amplitude ξ_T^c exakt mit den berechneten Werten aus [6] überein stimmen und daher die damaligen Ergebnisse, die aus Simulationen auf viel kleineren Gittern gewonnen wurden, eindrucksvoll bestätigen.

Das Verhalten der transversalen Spektralfunktion in der gebrochenen Phase kann mit Hilfe der Abbildung 4.7 am Beispiel der Kopplung $J = 0.95$ gezeigt werden. Zunächst ist auch hier festzuhalten, dass die transversale Masse für kleine Felder H noch stärker zu $\omega = 0$ rückt. Dieser Effekt verstärkt sich zudem bei immer höheren Kopplungen. Die Abstände zwischen zwei zu aufeinanderfolgenden Feldern H gehörenden Massenpeaks werden mit ansteigender Kopplungsstärke zunehmend kleiner. Da sich in der gebrochenen Phase für verschwindendes Magnetfeld H auf Grund des Goldstone-Effekts eine spontane Magnetisierung M_s ergibt, muss die transversale Suszeptibilität nach Gleichung (1.56) für $H \rightarrow 0$ divergieren. Dies führt in der gebrochenen Phase wegen

$$m_T^2 \sim \chi_T^{-1} = \frac{H}{M} \quad (4.7)$$

für $H \rightarrow 0$ zu einer Abhängigkeit

$$m_T \sim H^{1/2}, \quad (4.8)$$

die später noch genauer untersucht wird.

Festzuhalten bleibt abschließend, dass bei allen untersuchten Kopplungen nur innerhalb des Energiebereichs $\omega \in [0, 1]$ von Null verschiedene Beiträge zur Spektralfunktion gefunden werden konnten. Es waren jedoch neben dem Grundzustand weder weitere Peaks, die höhere Zustände repräsentieren würden, noch die Existenz eines zusätzlichen Kontinuumsbeitrags verifizierbar. Unsere Ergebnisse bestätigen somit

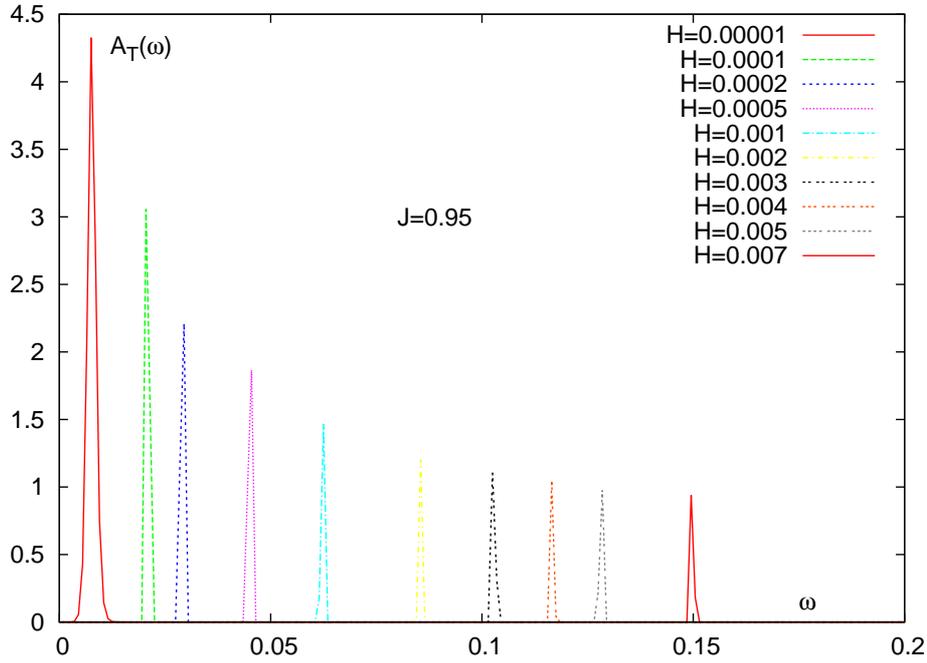


Abbildung 4.7: Die transversale Spektralfunktion $A_T(\omega)$ für $J = 0.95$.

die Grundannahme der Spintheorie [11] und der Quantenfeldtheorie [15], nach denen das Spektrum des transversalen Kanals dem Gaußschen Modell entspricht und folglich durch einen 1-Pol-Korrelator mit der Masse $m = m_T$ vollständig beschrieben werden kann. Hingegen kann die in [8, 9] aufgestellte Hypothese zur Existenz eines weiteren Kontinuumsbeitrages nicht bestätigt werden.

Um die gefundenen Resultate für das transversale Spektrum auf ihre Konsistenz hin zu überprüfen, wurde eine Variation des Default-Modells vorgenommen. Zunächst wurde lediglich die Halbwertsbreite in der Breit-Wigner-Näherung schrittweise bis auf $\varepsilon = 0.5$ erhöht. Im weiteren wurde eine Konstante als Default-Modell getestet. In allen Fällen ergaben sich jedoch keinerlei Abweichungen in der Peakposition von den bisherigen Spektralfunktionen für den transversalen Kanal, so dass die MEM-Resultate für das transversale Spektrum als gesichert angesehen werden können.

4.3.2 Korrelationsfunktion und transversale Masse

Im folgenden soll die Beziehung zwischen transversaler Korrelationsfunktion G_T und transversaler Masse m_T genauer untersucht werden. Die transversale Korrelationsfunktion ist nach Gleichung (1.33) unter Verwendung der Beziehung (1.81) durch

$$G_T(\mathbf{x}) \underset{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty}{\sim} e^{-m_T |\mathbf{x}|} \quad (4.9)$$

mit der transversalen Masse m_T in direkten Zusammenhang zu setzen. Da im folgenden lediglich die Zweiebenen-Korrelationsfunktionen betrachtet und analysiert werden, soll zukünftig auf die besondere Kennzeichnung durch das Dach bei \hat{G} verzichtet werden. Da im transversalen Spektrum durch unsere Untersuchungen jeweils nur ein scharf gepeakter Beitrag gefunden wurde, kann der transversale Kanal durch einen 1-Pol-Korrelator mit der Masse m_T komplett beschrieben werden. Übertragen wir diesen Zusammenhang auf die von uns an den diskreten Stellen $\tau = 1, 2, \dots, L/2$ gemessene Zweiebenen-Korrelationsfunktion $G_T(\tau)$, so kann mit dem in Kapitel 2.4 gefundenen Ausdruck (2.73) eine Überprüfung unserer gemessenen transversalen Masse durch

$$G_T(\tau) = \frac{M \tanh\left(\frac{m_T}{2}\right)}{H(1 - e^{-m_T L})} (e^{-m_T \tau} + e^{-m_T(L-\tau)}), \quad (4.10)$$

durchgeführt werden, da sich durch Einsetzen der von uns mittels MEM berechneten transversalen Masse die gemessene Korrelationsfunktion ergeben müsste. Gleichzeitig kann mit Hilfe dieses Ansatzes ein Fit zum Auffinden einer *besten* transversalen Masse mit m_T als freiem Parameter durchgeführt werden. Ein Vergleich dieses Fit-Wertes mit dem von uns durch MEM ermittelten Wert stellt somit eine gute Überprüfung unserer Resultate dar.

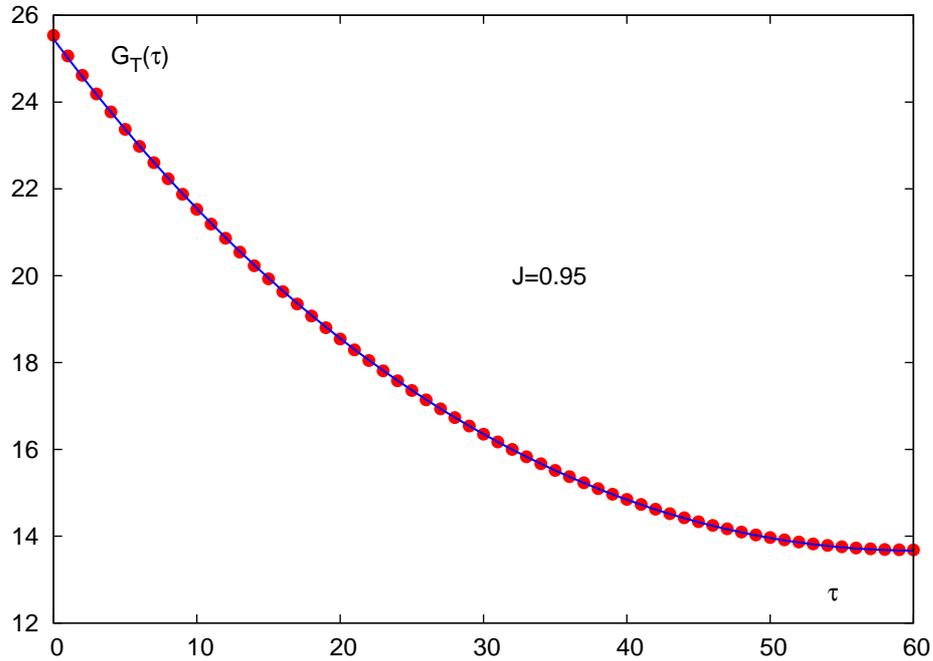


Abbildung 4.8: Das Fit-Ergebnis (Linie) und die gemessene Korrelationsfunktion $G_T(\tau)$ (Punkte) für $J = 0.95$ bei einem äußeren Feld von $H = 0.0001$.

Die Ergebnisse der durchgeführten Fits für die einzelnen Kopplungen sind in den Tabellen A.10 und A.11 im Anhang einsehbar. In Abbildung 4.8 ist stellvertretend für

die gebrochene Phase einmal das Ergebnis des durchgeführten Fits mit Ansatz (4.10) und dem gemessenen Wert für die Magnetisierung für die Kopplung $J = 0.95$ bei einem äußeren Feld $H = 0.0001$ dargestellt. Der als durchgezogene Linie sichtbare Fit, der die Ausgangskorrelation ausgezeichnet beschreibt, liefert als Fit-Ergebnis für die transversale Masse den Wert $m_T^{fit} = 0.020553$, während der von uns mittels MEM gemessene Wert der transversalen Masse bei $m_T = 0.020561$ liegt. Ein Vergleich dieser beiden Resultate macht deutlich, wie gut diese Werte innerhalb des Fehlerbereichs übereinstimmen und damit unsere Messungen eindrucksvoll bestätigt werden. Allgemein lässt sich sagen, dass alle mittels Gleichung (4.10) durchgeführten Fits für den Bereich $J \geq J_c$ eine transversale Masse lieferten, die entweder exakt mit der von uns aus MEM erhaltenen transversalen Masse übereinstimmte oder innerhalb des durch die Diskretisierung der Energieskala gegebenen Fehlers von $\Delta\omega = 10^{-3}$ lag. Somit ergab sich durch Einsetzen der mittels MEM bestimmten transversalen Masse in Gleichung (4.10) bei allen Kopplungen in der gebrochenen Phase eine sehr gute Übereinstimmung mit der Ausgangskorrelationsfunktion.

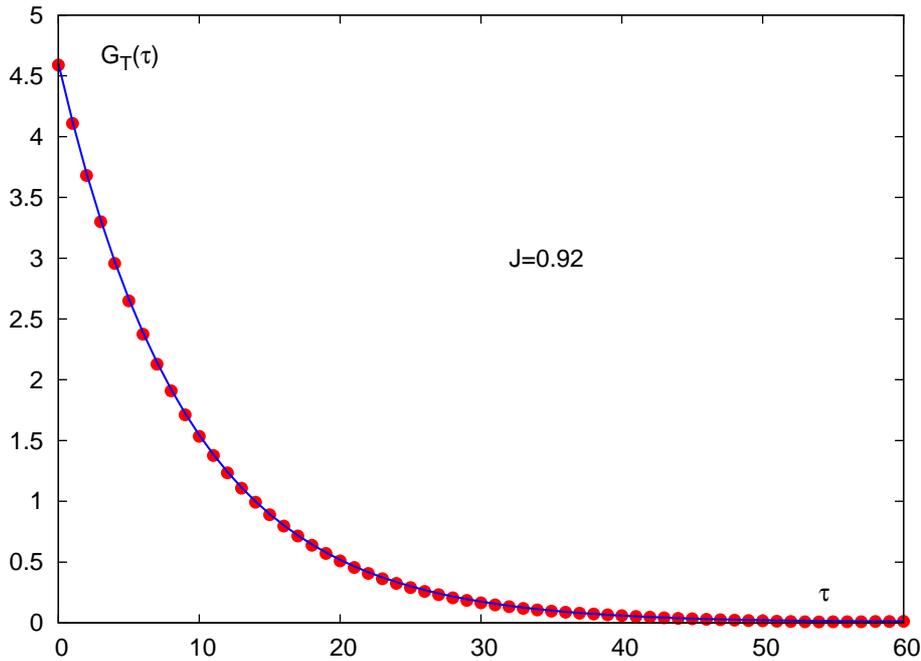


Abbildung 4.9: Das Fit-Ergebnis (Linie) und die gemessene Korrelationsfunktion $G_T(\tau)$ (Punkte) für $J = 0.92$ bei einem äußeren Feld $H = 0.0001$.

Für den Bereich der symmetrischen Phase ($J < J_c$) kann diese generelle Aussage aber ohne Einschränkungen nicht gemacht werden. Hier war zu beobachten, dass für die niedrigste Kopplung $J = 0.90$ unabhängig vom äußeren Feld kleine Abweichungen des Fit-Ergebnisses vom gemessenen (MEM-)Wert der transversalen Masse vorlagen. Wie Tabelle A.10 zu entnehmen ist, liegen die Abweichungen zwischen 1,5

und 2% und damit außerhalb des Fehlerbereiches. Eine Vergleichsrechnung auf der Basis der beiden Bedingungen für die transversale Suszeptibilität ergab, wie schon bei $J = 0.85$ in Kapitel 4.2 gefunden, einen für diese Fälle zu niedrigen Messwert der Magnetisierung als Ursache für diese Abweichung. Offensichtlich war auch hier die von uns gewählte Anzahl von Clusterupdates zwischen den einzelnen Messungen noch zu gering. Die Durchführung eines weiteren Fits mit dem über die Suszeptibilitäts-Vergleichsrechnung ermittelten korrigierten Wert für die Magnetisierung M lieferte anschließend die von uns gemessene transversale Masse.

Für die größeren Kopplungen $J = 0.91, 0.92$ und 0.93 ergab sich bei allen untersuchten Feldstärken genau wie in der gebrochenen Phase eine nahezu komplette Übereinstimmung der ermittelten Fit-Werte für die transversale Masse mit den von uns aus MEM extrahierten Daten. Für die symmetrische Phase ist beispielhaft in Abbildung 4.9 bei einer Kopplung $J = 0.92$ und einem äußeren Feld $H = 0.0001$ das Ergebniss dargestellt. Wiederum wird das Fit-Ergebnis, dass einem Wert für die transversale Masse von $m_T = 0.109103$ entspricht, als durchgezogene Linie dargestellt. Die mit roten Kreisen dargestellte Ausgangskorrelation wird auch in diesem Fall durch den Fit ausgezeichnet beschrieben. Der von uns aus MEM erhaltene Wert liegt bei $m_T = 0.109497$, also in bester Übereinstimmung mit dem 1-Pol-Fit.

4.3.3 Bestimmung der Stiffness c_s

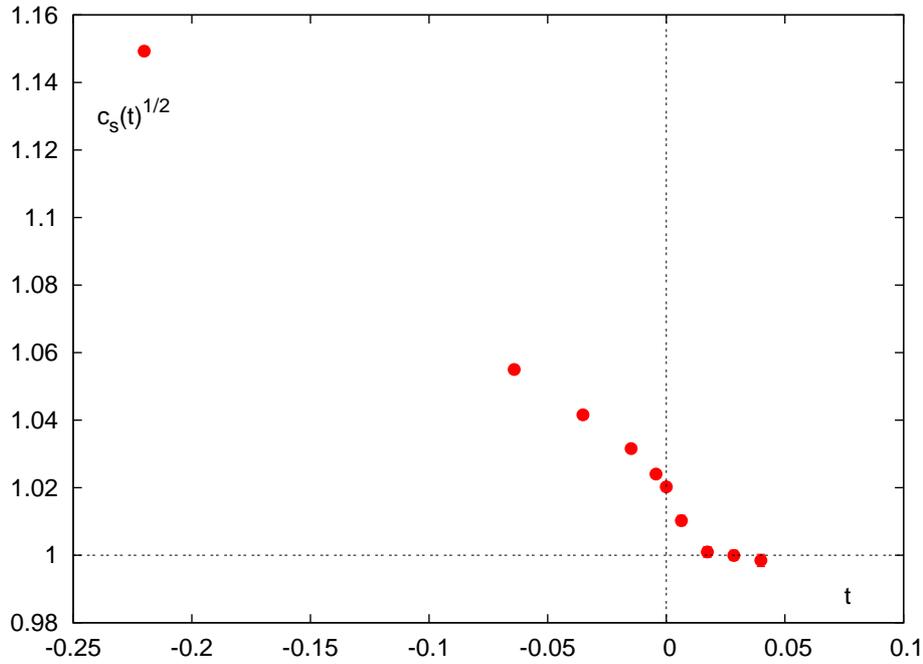
Gemäß Gleichung (2.11) ist die Stiffness c_s nach [11] als

$$c_s = \frac{1}{m_T^2 \chi_T} = \frac{H}{m_T^2 M}$$

gegeben. Sie ist ein Maß für die Abweichung des Quadrats der transversalen Masse vom Wert der inversen transversalen Suszeptibilität. Um den direkten Abweichungsgrad der Massen zu erhalten, soll im folgenden die Quadratwurzel der Stiffness $\sqrt{c_s}$ betrachtet werden. Nach [11] ist die Stiffness nur in der symmetrischen Phase von 1 verschieden. Für die einzelnen Kopplungen und äußeren Felder sind die ermittelten Werte von $\sqrt{c_s}$ im Angang dargestellt. Separat für jede Kopplung wurde die errechnete Stiffness über dem äußeren Feld H aufgetragen und anschließend mit der χ^2 -Methode ein Geradenfit unter der Annahme $c_s \neq c_s(H)$ durch die Datenpunkte gelegt. Dabei ergaben sich die in Tabelle 4.3 dargestellten Fit-Werte für die einzelnen Kopplungen, die anschließend über der reduzierten Temperatur $t = (T - T_c)/T_c$ in Abbildung 4.10 aufgetragen wurden.

Man erkennt sehr deutlich, dass die Fit-Werte der symmetrischen Phase ($t > 0$) in guter Näherung das in [11] vorhergesagte Verhalten für die Stiffness bestätigen. Bei Annäherung an den kritischen Punkt scheinen zunehmend Einflüsse der gebrochenen

J	$\sqrt{c_s^{fit}}$
0.90	0.9985(18)
0.91	0.9999(16)
0.92	1.0009(16)
0.93	1.0108(16)
0.9359	1.0202(13)
0.94	1.0242(11)
0.95	1.0316(10)
0.97	1.0416(13)
1.00	1.0550(13)
1.20	1.1493(13)

Tabelle 4.3: Fit-Werte der Stiffness für die einzelnen Kopplungen J .Abbildung 4.10: Die Fit-Resultate zum Verhalten der Stiffness $\sqrt{c_s}$ aufgetragen über der reduzierten Temperatur t .

Phase ($t < 0$) an Bedeutung zu gewinnen, da sich ein geringfügig von 1 verschiedener Wert für $\sqrt{c_s}$ einstellt. Nach Überschreitung der kritischen Kopplung erhält man im kalten Regime den erwarteten Unterschied zwischen transversaler Masse und dem Inversen der Suszeptibilität, wobei sich $\sqrt{c_s}$ mit zunehmender Kopplungsstärke immer weiter vom Wert 1 entfernt. Ein funktionaler Verlauf für $\sqrt{c_s(t)}$ konnte leider nicht gefunden werden.

4.3.4 Skalenfunktion der transversalen Korrelationslänge

Von Engels et al. wurden erstmals in [6] Untersuchungen zu den Skalenfunktionen der Korrelationslängen für das O(4)-Modell durchgeführt, zu deren Verlauf bis zu diesem Zeitpunkt noch keine theoretischen Vorhersagen existierten. Mit unseren Resultaten für die transversale Masse m_T am kritischen Punkt, in der gebrochenen und in der symmetrischen Phase lässt sich nun ebenfalls die Skalenfunktion g_ξ^T der transversalen Korrelationslänge des O(4)-Modells direkt über die Beziehung

$$m_T = \frac{1}{\xi_T} \quad (4.11)$$

bestimmen. Ziel dabei ist insbesondere eine Bestätigung und mögliche Verfeinerung der damaligen Ergebnisse durch unsere Untersuchungen. Nach [6] ergibt sich als Zustandsgleichung der transversalen Korrelationslänge ξ_T in der Nähe des kritischen Punktes

$$\begin{aligned} \xi_T(\bar{t}, h) &= h^{-\nu_c} g_\xi^T \left(\bar{t} h^{-\frac{1}{\beta\delta}} \right) \\ &= h^{-\nu_c} g_\xi^T(z) \end{aligned} \quad (4.12)$$

mit einer neuen Skalenfunktion g_ξ^T , wobei $h = H/H_0$ das normierte äußere Feld darstellt. Die Skalenvariable z ist durch die Definition

$$z \equiv \bar{t} h^{-\frac{1}{\beta\delta}} \quad (4.13)$$

mit $\bar{t} = (T - T_c)/T_0$ als normierter reduzierter Temperatur gegeben. Die Normierungskonstanten T_0 und H_0 sind so gewählt, dass

$$M(t < 0, H = 0) = (-\bar{t})^\beta \quad \text{und} \quad M(t = 0, H > 0) = h^{1/\delta} \quad (4.14)$$

gelten. Die Skalenfunktion g_ξ^T lässt sich nun direkt aus Gleichung (4.12) zu

$$g_\xi^T(z) = \frac{h^{\nu_c}}{m_T} \quad (4.15)$$

bestimmen. Durch eine zusätzliche Normierung mit dem am kritischen Punkt von [6] gefundenen Wert $g_\xi^T(0) = 0.444(3)$ erhält man die normierte Skalenfunktion

$$\hat{g}_\xi^T(z) = \frac{h^{\nu_c}}{g_\xi^T(0) m_T}. \quad (4.16)$$

Für $z \rightarrow \infty$ findet man als asymptotische Form

$$\hat{g}_\xi^T(z) \underset{z \rightarrow \infty}{=} \frac{\xi^+ B^{\nu/\beta} z^{-\nu}}{g_\xi^T(0)}, \quad (4.17)$$

die sich mit den beiden kritischen Amplituden $\xi^+ = 0.466(2)$ und $B = 0.9916(5)$ von [6] auswerten lässt. Zur Bestimmung der Skalenfunktion wurden alle in Tabelle 4.1 aufgeführten Parameterbereiche für die Kopplung J und das äußere Feld H verwendet. Da die Ergebnisse für die Kopplung $J = 1.20$ aber deutlich außerhalb des in [6] gefundenen Skalenbereichs lagen, innerhalb dessen die Datenpunkte für verschiedene Parameterpaare (J, H) ohne erkennbare Abweichungen noch skalieren, blieben diese unberücksichtigt. Abbildung 4.11 zeigt die normierte Skalenfunktion

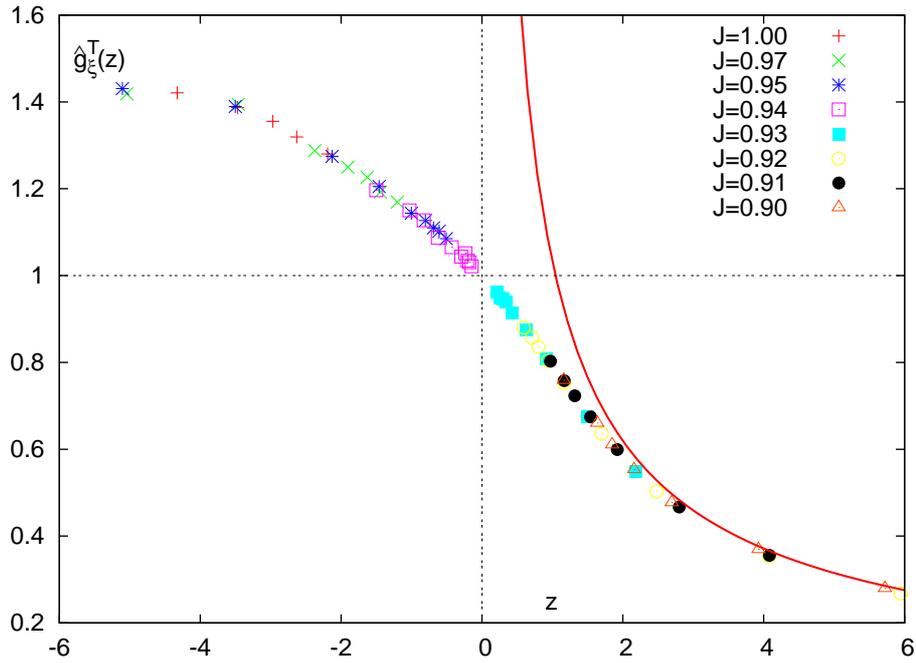


Abbildung 4.11: Skalenfunktion der transversalen Korrelationslänge $\hat{g}_\xi^T(z) = h^{\nu_c}/(g_\xi^T(0) m_T)$. Die durchgezogene Linie beschreibt die asymptotische Form nach Gleichung (4.17).

der transversalen Korrelationslänge als Funktion von z . Es zeigt sich, dass alle aufgetragenen Datenpunkte dem aus [6] bekannten Verlauf von \hat{g}_ξ^T sehr gut folgen und sich daher in guter Übereinstimmung mit den damals gefundenen Resultaten befinden. Der von $z = 0$ am weitesten entfernte Datenpunkt gehört jeweils zum kleinsten Feld bei jeder Kopplung. Mit wachsendem äußeren Feld H nähern sich die Datenpunkte der gepunkteten Linie für $z = 0$ an. Ein genauer Blick in den Bereich $z < 0$ lässt aber auch erkennen, dass wahrscheinlich die Datenpunkte für die jeweils größten Felder nicht mehr so gut skalieren, da jeweils eine leichte Abweichung nach unten zu beobachten ist. Für $z > 0$ erkennt man eine frühe Annäherung der Datenpunkte an die asymptotische Form aus Gleichung (4.17).

4.4 Das longitudinale Spektrum

4.4.1 Spektralfunktionen im longitudinalen Kanal

Auch für das longitudinale Spektrum soll eingangs eine rein qualitative Beschreibung erfolgen, bevor im nächsten Abschnitt der Verlauf der longitudinalen Spektralfunktion zu den einzelnen Kopplungen detailliert besprochen und mit dem transversalen Kanal verglichen wird. Zunächst findet man allgemein im Gegensatz zum transversalen Kanal in den longitudinalen Spektralfunktionen bei fast allen Kopplungen neben dem als Grundzustand aufzufassenden niedrigsten Niveau weitere angeregte Zustände durch scharfe Peaks im Spektrum. Allgemein zeigt sich, dass die höher angeregten Zustände in ihrer Peakhöhe grundsätzlich niedriger liegen als tiefere Zustände, dafür allerdings die Halbwertsbreite zunimmt. Darüber hinaus verlieren die Peaks bei fester Kopplung J , genau wie im transversalen Fall, für größer werdendes äußeres Feld H stetig an Höhe. Dies gilt ebenso mit sinkender Kopplungsstärke J bei festgehaltenem Feld H . Aus den in Kapitel 4.3.1 genannten Gründen wird auch im longitudinalen Fall auf eine quantitative Analyse der Peakhöhen verzichtet. Die aus den Spektralfunktionen ermittelten Energieniveaus sind ebenfalls in den Tabellen A.7, A.8 und A.9 des Anhangs aufgelistet. Generell muss an dieser Stelle angemerkt werden, dass unser Default-Modell (2.65) für das longitudinale Spektrum ein Kontinuum ab $\omega = 2m_T$ vorhergesagt hat, das von uns jedoch nicht gefunden wurde. Aus diesem Grund wurde das Default-Modell für den longitudinalen Kanal nachträglich durch Verwendung einer Breit-Wigner-Näherung gemäß Gleichung (4.3) für einen Peak bei $\omega = 2m_T$ abgewandelt. Auch durch die Verwendung einer Konstanten als Default-Modell konnte bei unseren MEM-Resultate keine Veränderung in der Lage und Anzahl der Peaks verzeichnet werden.

Zwischen den einzelnen Temperaturbereichen zeigt sich im Verlauf der longitudinalen Spektralfunktion ein deutlicher Unterschied, der nun im einzelnen betrachtet werden soll. Repräsentativ für alle anderen Kopplungen werden die longitudinalen Spektralfunktionen $A_L(\omega)$ für $J = 0.92$, $J = J_c = 0.9359$ und $J = 0.95$ in den Abbildungen 4.12, 4.13 und 4.14 für die beiden Phasen und für die kritische Kopplung diskutiert. Dabei wurde wieder nur jeweils der Bereich geplottet, bei dem die Spektralfunktion von Null verschieden ist.

In Abbildung 4.12 ist am Beispiel der Kopplung $J = 0.92$ das longitudinale Spektrum für die symmetrische Phase des Modells dargestellt. Man erkennt zunächst den deutlich ausgeprägten ersten Peak, der den Grundzustand repräsentiert. Darüber hinaus ist bei genauerem Hinsehen auch ein weiterer angeregter Zustand mit allerdings sehr geringer Peakhöhe zu erkennen. Dieser Anregungszustand tritt bei dieser Kopplung allerdings erst ab einem äußeren Feld von $H = 0.001$ auf. Für kleinere

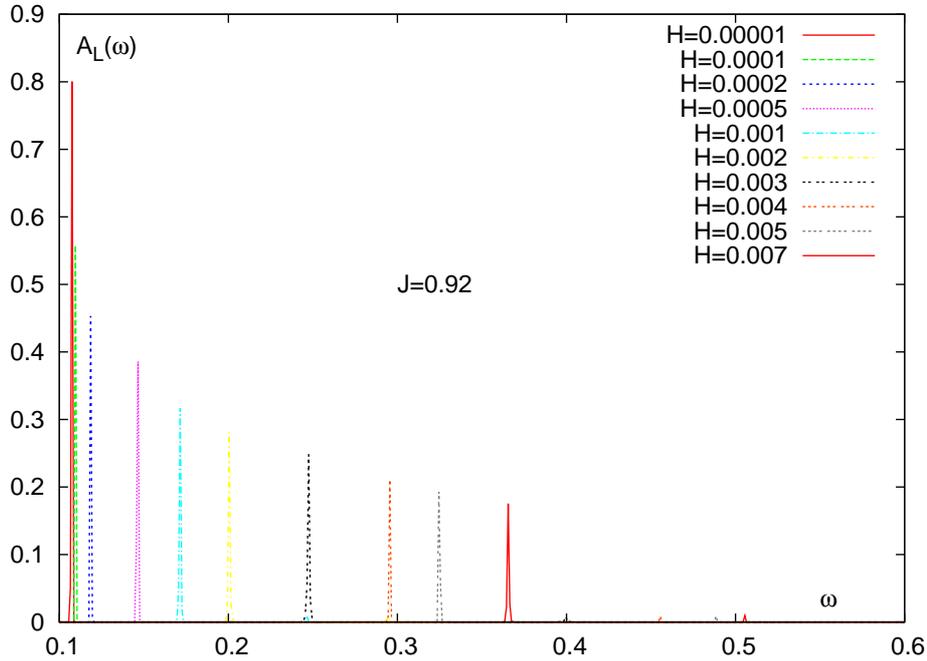


Abbildung 4.12: Die longitudinale Spektralfunktion $A_L(\omega)$ für $J = 0.92$. Im Bereich $\omega = 0.4$ und 0.5 sind die kleinen Peaks des ersten angeregten Zustandes zu sehen.

Felder konnte lediglich der Grundzustand nachgewiesen werden. Ein Vergleich dieses Befundes mit den Spektraldaten bei anderen Kopplungen in der symmetrischen Phase liefert die Erkenntnis, dass zwar für die nahe dem kritischen Punkt liegende Kopplung $J = 0.93$ für alle kleinen äußeren Felder ein angeregter Zustand gefunden werden kann, ab einer Kopplungsstärke von $J = 0.91$ aber ein solcher Anregungszustand nicht mehr besteht oder nicht mehr nachgewiesen werden kann. Im gesamten Bereich der symmetrischen Phase ist außerdem zu beobachten, dass sich der Grundzustand für verschwindendes äußeres Feld gegen einen konstanten und von Null verschiedenen Wert bewegt. Dies ist eine Folge der bereits bekannten Tatsache, dass die longitudinale Korrelationslänge ξ_L , die dem Inversen des niedrigsten Zustandes entspricht, für verschwindendes H -Feld einen endlichen Wert annimmt. Analog zum transversalen Kanal ist bei immer niedrigeren Kopplungen ein zunehmendes lineares Verhalten des longitudinalen Grundzustandes in Abhängigkeit von H zu erkennen. Für die von uns verwendete niedrigste Kopplung $J = 0.90$ kann dies bereits in erster Näherung für den gesamten Bereich des äußeren Feldes beobachtet werden.

Am kritischen Punkt findet man, wie in Abbildung 4.13 zu sehen, außer für das höchste Feld neben dem Grundzustand stets einen angeregten Zustand. Beim kleinsten Magnetfeld liegt sogar noch ein weiterer angeregter Zustand vor. Die ersten angeregten Zustände werden durch die kleineren Peaks repräsentiert, während der kleinste rote Peak in der Nähe von $\omega = 0.5$ den zweiten angeregten Zustand zu

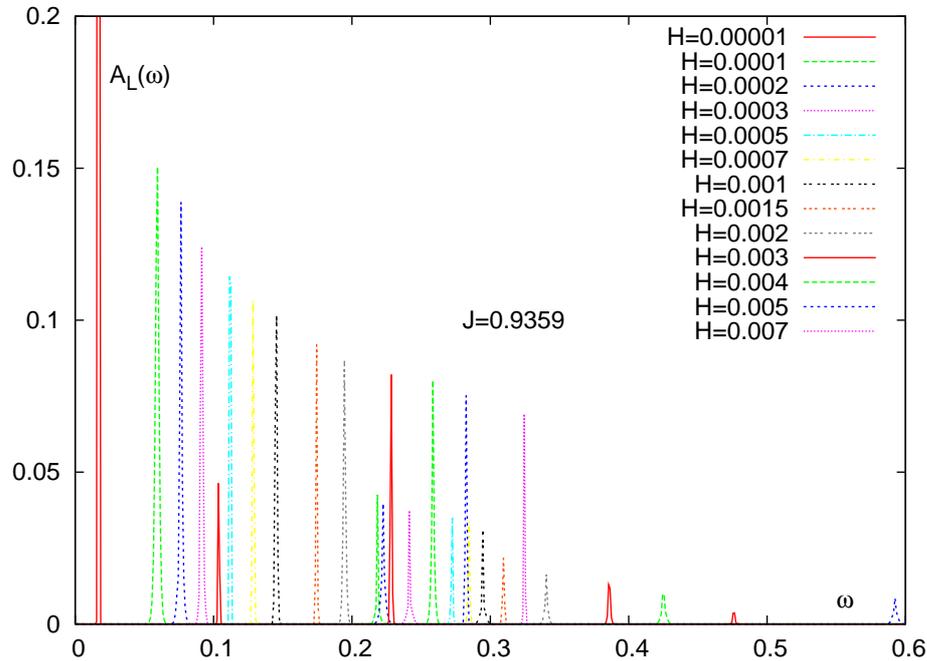


Abbildung 4.13: Die longitudinale Spektralfunktion $A_L(\omega)$ für $J = J_c = 0.9359$.

$H = 10^{-5}$ verkörpert. Im Fokus des Interesses steht natürlich der Grundzustand, dessen stetiger Verlauf in Abhängigkeit vom äußeren Feld einen funktionalen Zusammenhang zur transversalen Masse erkennen lässt, auf den im nächsten Kapitel näher eingegangen werden soll.

Abbildung 4.14 zeigt den Verlauf der longitudinalen Spektralfunktion in der gebrochenen Phase am Beispiel der Kopplung $J = 0.95$. Zunächst ist wieder im Bereich kleiner ω der Grundzustand zu finden, der allerdings, wie bei allen anderen Kopplungen der gebrochenen Phase auch, mit wachsendem äußeren Feld an Peakhöhe deutlich verliert und ab $H = 0.001$ gänzlich verschwunden ist. Für denselben Magnetfeldbereich verharren die beiden angeregten Zustände im selben Energiebereich und beginnen erst nach dem Aussterben des niedrigsten Zustandes merklich auf der Energieskala zu wachsen. Umgekehrt bedeutet dies, dass beide Anregungen für $H \rightarrow 0$ gegen eine Konstante zu laufen scheinen. Mit steigender Kopplung J findet man, dass sich der Punkt in H , an dem der niedrigste Zustand verschwindet, langsam zu größeren Feldern verschiebt. Während im betrachteten Fall bei $H = 0.0005$ letztmalig dieser niedrigste Zustand zu erkennen ist, ist er im Falle $J = 1.20$ erst bei $H = 0.002$ nicht mehr vorhanden. Eine Vergleich bei $J = 0.94$ liefert wiederum, dass der niedrigste Zustand zwar bei $H = 0.0004$ noch vorhanden, bereits aber bei $H = 0.0005$ nicht mehr existent ist. Auf diesen Umstand wollen wir im folgenden Abschnitt noch einmal genauer eingehen.

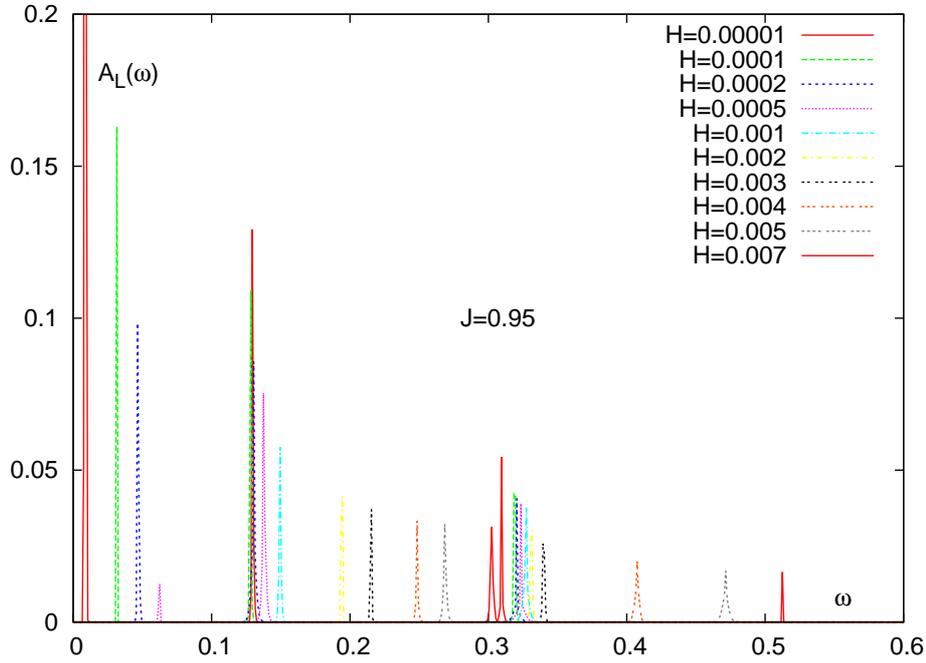


Abbildung 4.14: Die longitudinale Spektralfunktion $A_L(\omega)$ für $J = 0.95$.

4.4.2 Vergleich von transversalem und longitudinalem Spektrum

Wie gerade diskutiert, zeigt die longitudinale Spektralfunktion in den einzelnen Temperaturbereichen des $O(4)$ -Modells ein sehr unterschiedliches Verhalten. Wie dieses im Zusammenhang mit der transversalen Masse zu sehen ist, soll nun näher betrachtet und analysiert werden. Zu diesem Zweck wurden für jede Kopplung J separat die transversalen und longitudinalen Peaks über dem äußeren Feld H geplottet. In den folgenden Figuren wird die transversale Masse jeweils durch schwarze Diamanten dargestellt. Für die Darstellung des longitudinalen Spektrums wurden dem bei sehr kleinen H niedrigsten Zustand die roten Kreise, der ersten Anregung die grünen Quadrate und dem zweiten angeregten Zustand die blauen Dreiecke zugewiesen. Zusätzlich wurden alle zusammen gehörenden Datenpunkte der entsprechenden Niveaus durch eine Linie miteinander verbunden, um die funktionale Abhängigkeit vom äußeren Feld besser abbilden zu können. Die gestrichelte schwarze Linie symbolisiert die jeweilige doppelte transversale Masse, die als Referenz für das Default-Modell eingezeichnet wurde.

Der Verlauf in der symmetrischen Phase kann den Abbildungen 4.15 bis 4.18 für die Kopplungen $J = 0.90, 0.91, 0.92$ und 0.93 entnommen werden. Hier wurden die gemessenen Energiepeaks jeweils in Abhängigkeit von H aufgetragen, wobei man

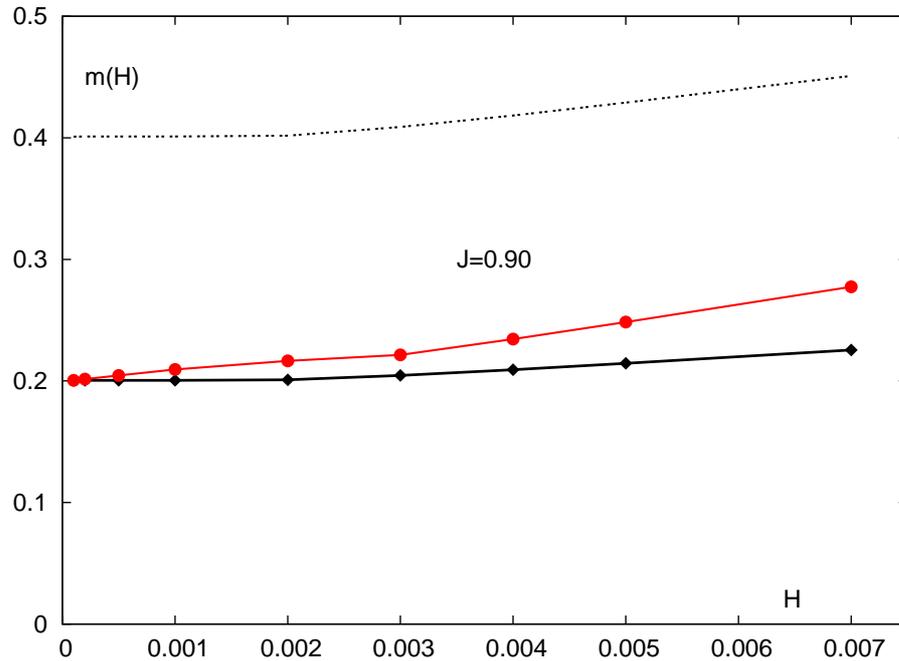


Abbildung 4.15: Vergleich der Magnetfeldabhängigkeit der transversalen und longitudinalen Energieniveaus für $J = 0.90$. Die transversale Masse m_T wird durch die schwarzen Diamanten dargestellt, und die roten Kreise symbolisieren den niedrigsten Zustand des longitudinalen Spektrums. Die schwarze gestrichelte Linie entspricht der doppelten transversalen Masse.

durch einen Vergleich aller vier Kopplungen der symmetrischen Phase sofort erkennen kann, dass beginnend mit $J = 0.93$ bei sinkender Kopplungsstärke analog zum Verhalten der Magnetisierung H ein nahezu linearer Verlauf der transversalen Masse vorliegt, wobei die transversale Masse für $H \rightarrow 0$ wegen der Endlichkeit der Korrelationslänge konstant wird und nicht gegen Null geht. Dieser Bereich, in dem m_T als konstant betrachtet werden kann, erstreckt sich für die Kopplungen nahe dem kritischen Punkt zunächst nur auf kleine Felder H und wird mit sinkender Kopplung immer größer, bis er schließlich bei $J = 0.90$ (vgl. Abbildung 4.15) fast den kompletten von uns beobachteten Bereich des äußeren Feldes H einnimmt. Darüber hinaus ist in den Abbildungen 4.15 bis 4.18 zu erkennen, dass mit zunehmender Kopplungsstärke die transversale Masse für verschwindendes äußeres Feld H einen immer niedrigeren Wert annimmt und schließlich bei $J = 0.93$ schon nahezu bei Null liegt. Diese Tatsache ist nicht verwunderlich, da die in der symmetrischen Phase bei $H \rightarrow 0$ endliche Korrelationslänge am kritischen Punkt divergiert und damit $m_T = \xi_T^{-1}$ auf Null geht.

Der Grundzustand des longitudinalen Spektrums ist beim jeweils kleinsten Wert des Feldes H stets auf der einfachen transversalen Masse zu finden. Dieses Verhalten ist

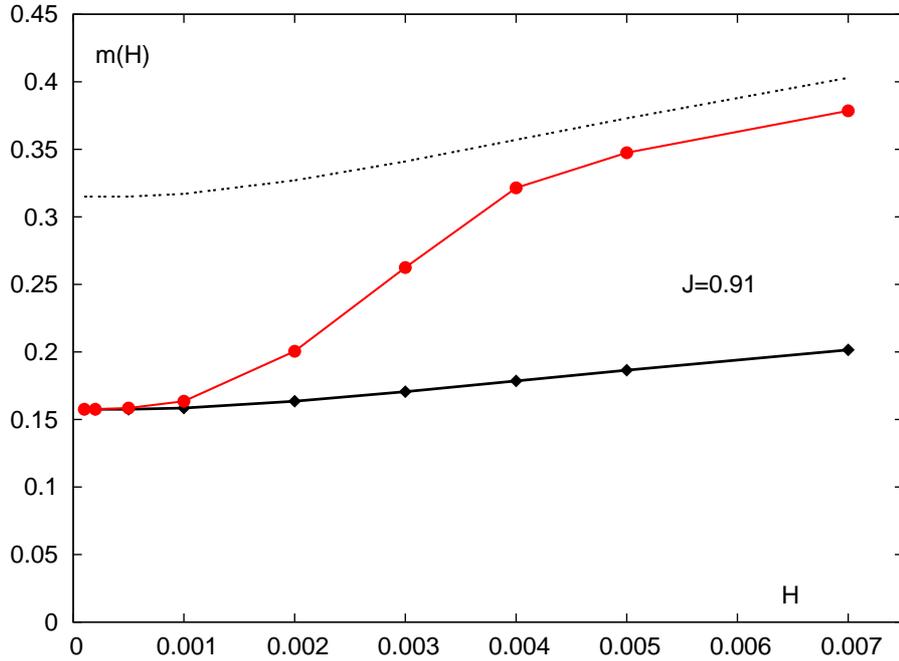


Abbildung 4.16: Vergleich der Magnetfeldabhängigkeit der transversalen und longitudinalen Energieniveaus für $J = 0.91$. Die Symbole entsprechen der in Abbildung 4.15 gewählten Zuordnung.

auch vernünftig, da sich für $T > T_c$ und $H \rightarrow 0$ $m_L = m_T$ ergeben muss. Für ein ansteigendes äußeres Feld und damit stärker werdender expliziter Symmetriebrechung entfernt sich der longitudinale Grundzustand von der einfachen transversalen Masse und bewegt sich je nach Kopplungsstärke unterschiedlich schnell auf die doppelte transversale Masse zu. Während bei den Kopplungen $J = 0.92$ und 0.93 diese Wanderung in beschleunigter Weise schon für kleine Felder einsetzt und die doppelte transversale Masse ab $H = 0.004$ bereits nahezu erreicht wird, erkennt man für die niedrigste Kopplung $J = 0.90$ in Abbildung 4.15, dass der longitudinale Grundzustand innerhalb unseres Magnetfeldbereiches nur unwesentlich von der einfachen transversalen Masse abrückt und sich geringfügig oberhalb dieser, aber noch deutlich unterhalb der doppelten transversalen Masse einpendelt. Offensichtlich reicht die Stärke des Magnetfeldes gegenüber den zunehmenden Fluktuationen in der heißen Phase nicht mehr aus, um eine entsprechende Verlagerung von der einfachen zur doppelten transversalen Masse zu bewirken.

Für den ersten angeregten Zustand des longitudinalen Spektrums, der nur bei den Kopplungen $J = 0.92$ und 0.93 zu finden ist, lässt sich ein analoger Verlauf zum Grundzustand finden, wobei dieser bei kleinen Feldern knapp oberhalb der doppelten transversalen Masse startet und sich mit zunehmendem Feld fast parallel zum Anstieg des Grundzustandes von $2m_T$ nach höheren Energien weg bewegt und für

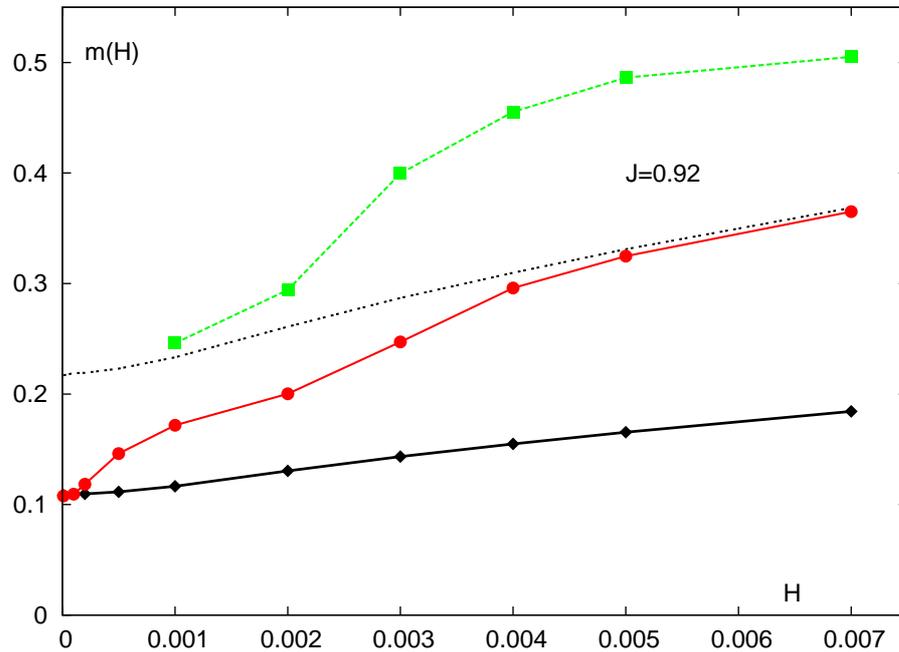


Abbildung 4.17: Vergleich der Magnetfeldabhängigkeit der transversalen und longitudinalen Energieniveaus für $J = 0.92$. Die Symbole entsprechen der in Abbildung 4.15 gewählten Zuordnung. Zusätzlich wird der erste angeregte Zustand durch die grünen Quadrate beschrieben.

große Felder ebenfalls einen festen Wert zwischen doppelter und dreifacher transversaler Masse anzunehmen scheint. Darüber hinaus kann festgehalten werden, dass für die Kopplung $J = 0.93$ schon ein nicht unerheblicher Einfluss des kritischen Verhaltens bei J_c zu verzeichnen ist, das im folgenden nun betrachtet werden soll. Für die kritische Kopplung J_c wurde bereits für das transversale Spektrum eine H^{ν_c} -Abhängigkeit der transversalen Masse gefunden, die sich auch in Abbildung 4.19 wiederfindet. Darüber hinaus ist auch für den Grundzustand des longitudinalen Spektrums im Bereich $0.0001 \leq H \leq 0.007$ eine H^{ν_c} -Abhängigkeit festzustellen, wobei der Grundzustand für diesen Magnetfeldbereich innerhalb des Fehlers auf der doppelten transversalen Masse liegt. Für das kleinste Feld $H = 10^{-5}$ findet man, dass der Grundzustand des longitudinalen Spektrums im Gegensatz zu den anderen Feldern der einfachen transversalen Masse entspricht. Weiterhin zeigt der erste angeregte Zustand des longitudinalen Spektrums hier ein atypisches Verhalten, da er sichtbar zu tief liegt. Zusätzlich ist nur bei diesem kleinsten Feld ein weiterer angeregter Zustand vorhanden. Dieser erste Datenpunkt ist allerdings von möglichen Finite-Size-Effekten betroffen, da er eine deutliche Abweichung von den gefundenen Ursprungsgeraden für die transversale und longitudinale Masse zeigt. Aus der Abbildung 4.19 lässt sich auch für den ersten angeregten Zustand im Bereich $0.0001 \leq H \leq 0.004$ in guter Näherung eine H^{ν_c} -Abhängigkeit finden.

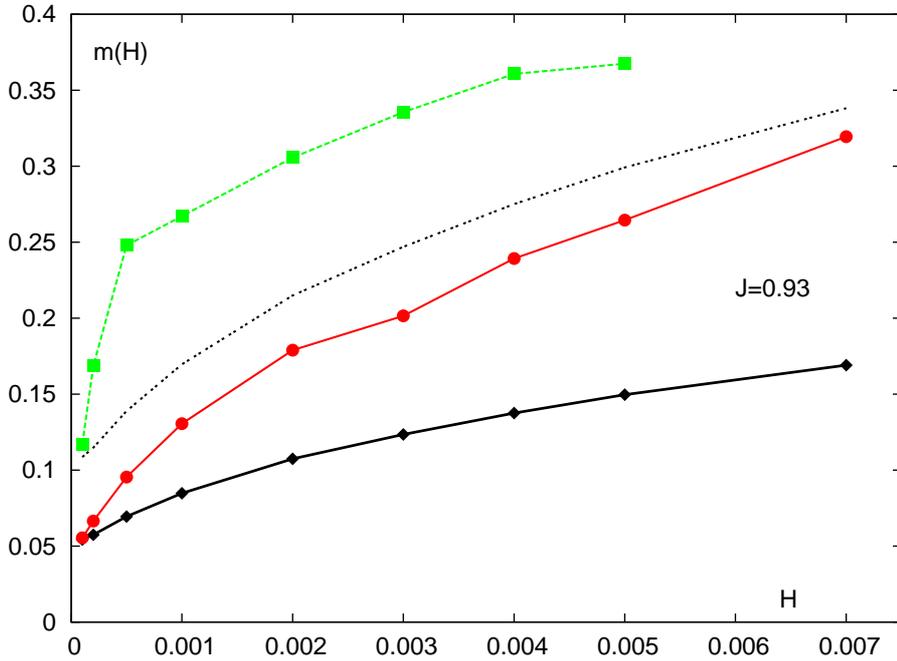


Abbildung 4.18: Vergleich der Magnetfeldabhängigkeit der transversalen und longitudinalen Energieniveaus für $J = 0.93$. Die Symbole entsprechen der in Abbildung 4.15 gewählten Zuordnung. Zusätzlich wird der erste angeregte Zustand durch die grünen Quadrate beschrieben.

Zum Verhältnis der Korrelationslängen des $O(4)$ -Modells konnte auf der kritischen Isotherme bereits der Zusammenhang $2\xi_L = \xi_T$ (2.14) nachgewiesen werden [6], der sich nun auch in analoger Weise für die Massen folgern lässt. Betrachtet man den Grundzustand des longitudinalen Spektrums als longitudinale Masse m_L , so lässt sich die Gültigkeit der bereits mit Gleichung (2.15) gefundenen Beziehung

$$m_L = 2 m_T$$

durch unsere Messdaten untersuchen. Es findet sich bei Vernachlässigung des zum kleinsten Feld gehörenden Messwertes

$$\frac{m_L}{m_T} = 1.995(8). \quad (4.18)$$

Dieses Resultat bestätigt damit nicht nur das theoretisch gefundene Verhältnis von longitudinaler und transversaler Masse am kritischen Punkt aus Gleichung (2.15), sondern stellt insbesondere eine sehr gute Übereinstimmung mit den bisher gefundenen Resultaten zum Verhältnis der Korrelationslängen dar, das seinerseits mit $\xi_T/\xi_L = 1.977(10)$ [13] beziehungsweise $1.99(1)$ [6] bestimmt werden konnte.

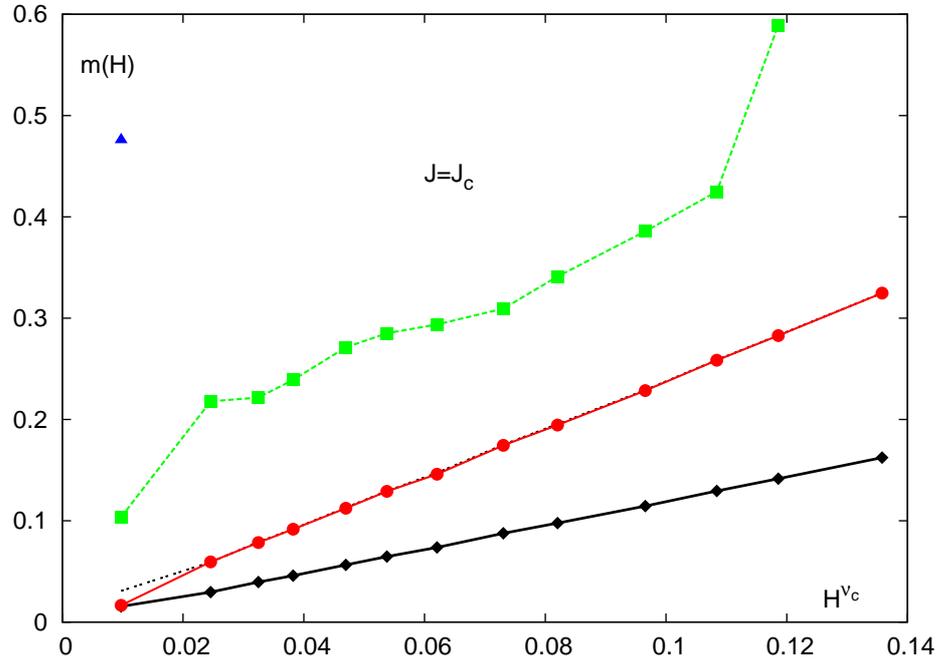


Abbildung 4.19: Die Energieniveaus der transversalen und longitudinalen Spektralfunktion bei $J = J_c = 0.9359$ als Funktion von H^{ν_c} . Die schwarzen Diamanten entsprechen der transversalen Masse m_T , die roten Kreise dem longitudinalen Grundzustand m_L , die grünen Quadrate dem ersten angeregten und das blaue Dreieck dem zweiten angeregten Zustand des longitudinalen Spektrums.

In der Tieftemperaturphase wurden die gemessenen Energiepeaks jeweils über der Quadratwurzel des äußeren Feldes aufgetragen, da für $J > J_c$ eine $H^{1/2}$ -Abhängigkeit der Massen wegen $\xi_T \sim H^{-1/2}$ [12] für kleine äußere Felder erwartet wird. Für die betreffenden Kopplungen $J = 0.94, 0.95, 0.97, 1.00$ und 1.20 sind die transversalen und longitudinalen Spektren in den Abbildungen 4.20 bis 4.24 zu sehen. Vergleicht man zunächst alle fünf Kopplungen der gebrochenen Phase miteinander, so fällt im Gegensatz zur symmetrischen Phase auf, dass bei allen Kopplungen für kleine Felder neben dem Grundzustand sowohl ein erster als auch ein zweiter Anregungszustand des longitudinalen Spektrums zu finden ist. Für höhere äußere Felder erhält man jedoch nur noch zwei Energieniveaus.

Zunächst kann aus den Abbildungen für $J > J_c$ die Proportionalität $m_T \sim H^{1/2}$ zweifelsfrei bestätigt werden. Aber auch die Zustände des longitudinalen Spektrums gehorchen allem Anschein nach zumindest in Teilbereichen des äußeren Feldes diesem Zusammenhang. Besonders auffällig im Vergleich zur Hochtemperaturphase ist allerdings der gesamte Verlauf des longitudinalen Grundzustandes. Bei allen Kopplungen ist festzustellen, dass der Grundzustand für kleine äußere Felder direkt auf oder nahe der einfachen transversalen Masse zu finden ist und mit ansteigendem

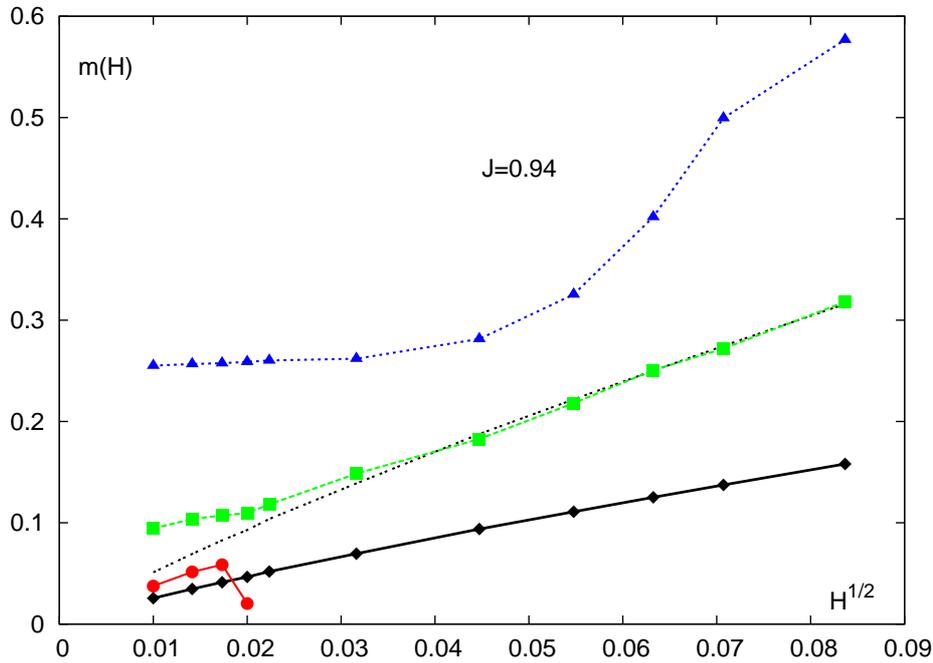


Abbildung 4.20: Die Energieniveaus der transversalen und longitudinalen Spektralfunktion bei $J = 0.94$ als Funktion von $H^{1/2}$. Die schwarzen Diamanten entsprechen der transversalen Masse m_T , die roten Kreise dem niedrigsten longitudinalen Zustand, die grünen Quadrate dem ersten angeregten und die blauen Dreiecke dem zweiten angeregten Zustand des longitudinalen Spektrums.

Feld H kaum von dieser Größenordnung abweicht. Im gleichen Magnetfeldabschnitt nähert sich der erste angeregte Zustand, der für kleine Felder aus einer Konstanten heraus deutlich oberhalb der doppelten transversalen Masse zu starten scheint, dieser doppelten transversalen Masse an. Plötzlich verschwindet der Grundzustand des longitudinalen Spektrums ab einem bestimmten Wert des äußeren Feldes und kurz darauf erreicht der ursprünglich erste Anregungszustand als neuer Grundzustand die doppelte transversale Masse, die er für weiter anwachsendes äußeres Feld nicht mehr verlässt. Der Ort auf der Magnetfeldskala, bei dem der alte Grundzustand nicht mehr nachgewiesen werden kann, steigt mit zunehmender Kopplungsstärke ebenfalls an. Obwohl dieser Grundzustand bei $J = 1.20$ noch bei einem Feld von $H = 0.001$ präsent und erst für höhere Felder verschwunden ist (Abbildung 4.24), kann er für die Kopplungen $J = 1.00, 0.97$ und 0.95 letztmalig bei $H = 0.0005$ nachgewiesen werden, während für $H = 0.001$ kein Nachweis möglich war.

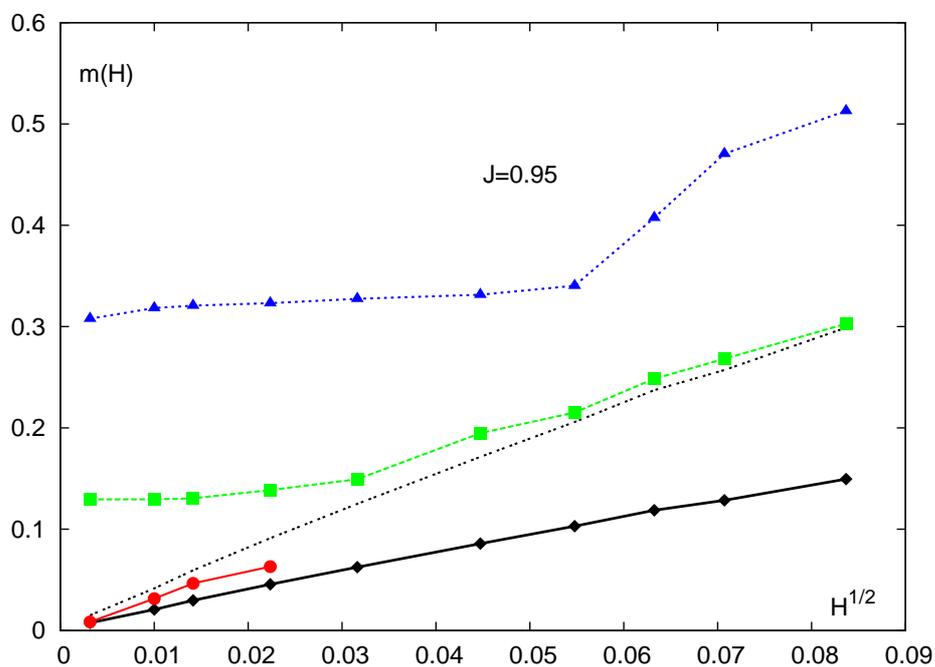


Abbildung 4.21: Die Energieniveaus der transversalen und longitudinalen Spektralfunktion bei $J = 0.95$ als Funktion von $H^{1/2}$.

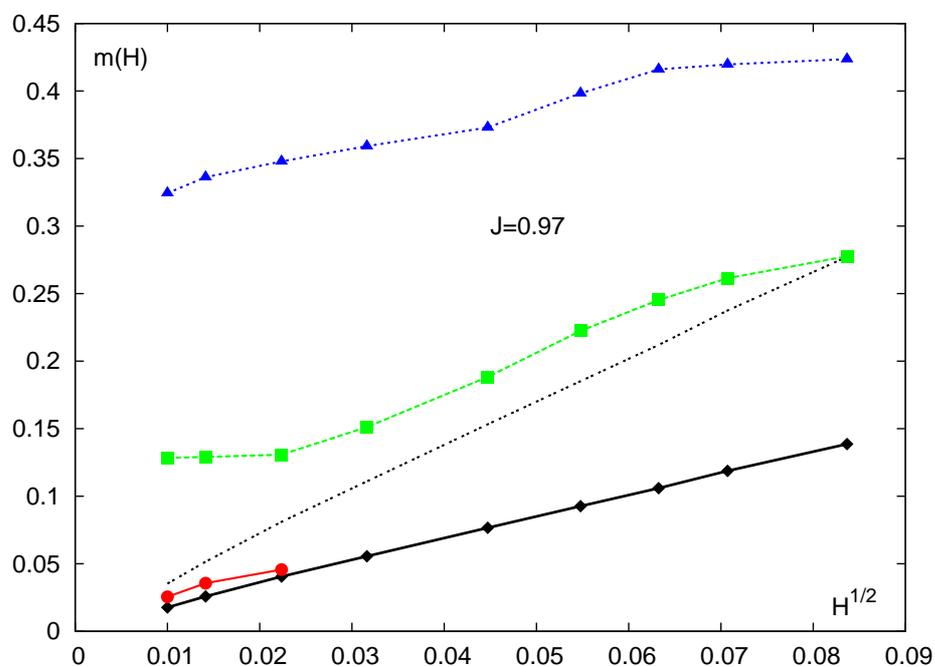


Abbildung 4.22: Die Energieniveaus der transversalen und longitudinalen Spektralfunktion bei $J = 0.97$ als Funktion von $H^{1/2}$.

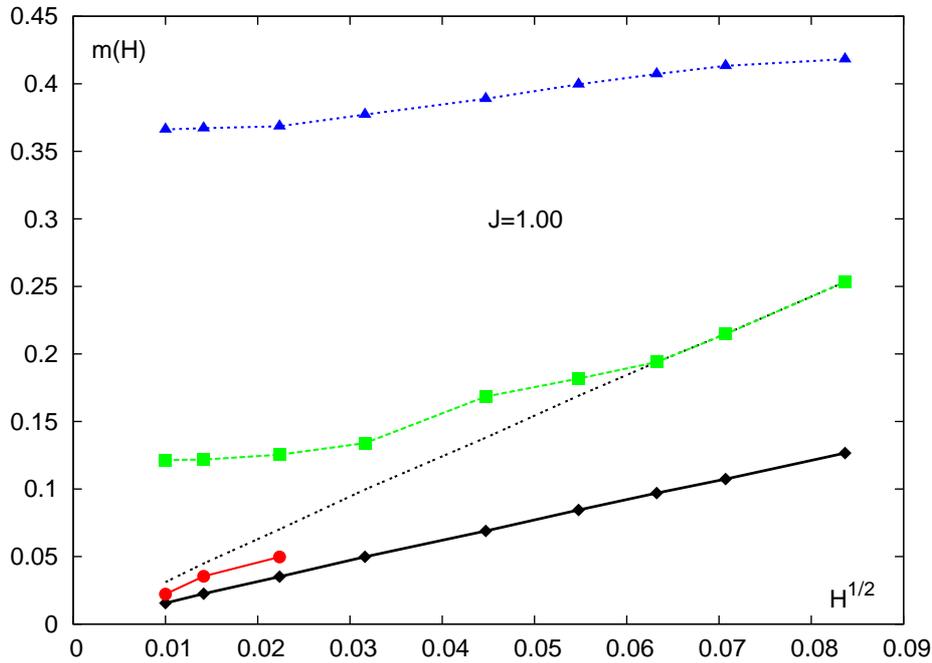


Abbildung 4.23: Die Energieniveaus der transversalen und longitudinalen Spektral-funktion bei $J = 1.00$ als Funktion von $H^{1/2}$. Die Symbole entsprechen der in Ab-bildung 4.20 gewählten Zuordnung.

Ein besonderes Augenmerk wollen wir nun auf Abbildung 4.20 richten. Zunächst lagen uns im relevanten Bereich für das Verschwinden des zuletzt niedrigsten Zu-standes lediglich Simulationsergebnisse zu den Feldern $H = 0.0002$ und $H = 0.0005$ vor. Dabei muss analog zu den gerade durchgeführten Betrachtungen für die anderen Kopplungen der gebrochenen Phase festgehalten werden, dass der zuletzt niedrigste Zustand bei $J = 0.94$ auch schon bei einem äußeren Feld von $H = 0.0005$ nicht mehr registriert werden konnte. Aus diesem Grund wurden von uns an den Stellen für $H = 0.0003$ und $H = 0.0004$ Nachsimulationen vorgenommen, die ein erstaunliches und in Abbildung 4.20 dargestelltes Resultat zum Vorschein brachten. Während für $H = 0.0003$ dieser Zustand existiert, kommt es bei $H = 0.0004$ zu einer über-raschenden Wendung. Das Niveau für den Grundzustand ist zwar noch vorhanden, aber zu einer deutlich niedrigeren und auch unterhalb der einfachen transversalen Masse liegenden Energie verschoben. Es ist daher anzunehmen, dass dieser Zustand bei einer weiteren geringfügigen Anhebung des äußeren Feldes verschwindet. Unter der Annahme, dass sich ein solches Verhalten für den longitudinalen Grundzustand auch bei den anderen Kopplungen in der gebrochenen Phase finden lässt, kann aus diesen Beobachtungen auf einen Energiesprung innerhalb des longitudinalen Spek-trums geschlossen werden, der dazu führt, dass bei einem von der Kopplung J abhängigen äußeren Feld H der bisherige Grundzustand verschwindet und der bis dahin erste angeregte Zustand die Funktion des neuen Grundzustandes übernimmt.

Die Existenz eines solchen Energiesprungs hat unmittelbare Auswirkungen auf das Skalenverhalten der longitudinalen Korrelationslänge ξ_L , sofern diese mit dem Inversen der longitudinalen Masse des Grundzustandes des longitudinalen Spektrums identifiziert wird. Hierzu wollen wir separate Untersuchungen anstellen. Der zweite

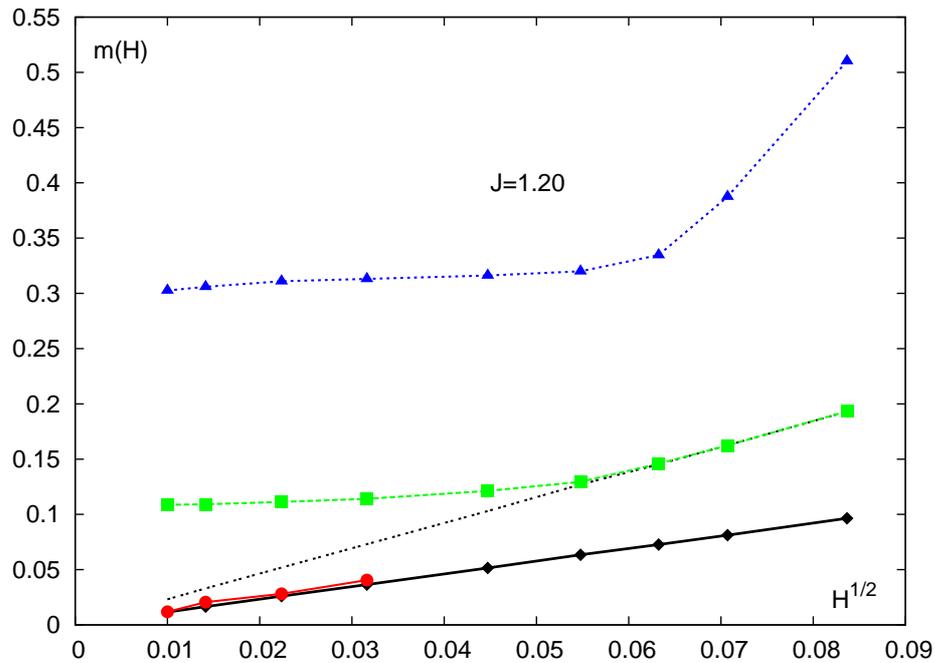


Abbildung 4.24: Die Energieniveaus der transversalen und longitudinalen Spektralfunktion bei $J = 1.20$ als Funktion von $H^{1/2}$. Die Symbole entsprechen der in Abbildung 4.20 gewählten Zuordnung.

angeregte Zustand scheint ebenfalls für kleiner werdendes Feld gegen eine Konstante zu streben. Abschließend kann festgehalten werden, dass die Massenpeaks des longitudinalen Grundzustandes in der gebrochenen Phase ein bislang unbekanntes Verhalten zeigen.

4.4.3 Beziehung zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion

Bevor wir den Geltungsbereich der PP-Gleichung (2.13) mit dem in Gleichung (2.89) gefundenen Ausdruck für die longitudinale Zweiebenen-Korrelationsfunktion überprüfen, ist es zunächst sinnvoll, sich genauer mit dem Verhalten der longitudinalen Suszeptibilität χ_L in der gebrochenen Phase zu beschäftigen. Die longitudinale Suszeptibilität divergiert auf der Koexistenzlinie ($T < T_c, H = 0$) für dreidimensionale

O(N)-Modelle (siehe [15, 19] und Gleichung (2.20)) mit

$$\chi_L(T < T_c, H) \sim H^{-\frac{1}{2}}$$

für $H \rightarrow 0$. Um sich von der Richtigkeit dieser Vorhersage zu überzeugen, wurden die für jede Kopplung J in der kalten Phase aus den Messgrößen berechneten longitudinalen Suszeptibilitäten über $H^{-1/2}$ aufgetragen. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.25 zu sehen, wobei lediglich der Bereich ab $H = 0.0003$ gezeigt wird, da bei den niedrigeren Feldern der Einfluss von Finite-Size-Effekte zu beobachten ist. Man kann

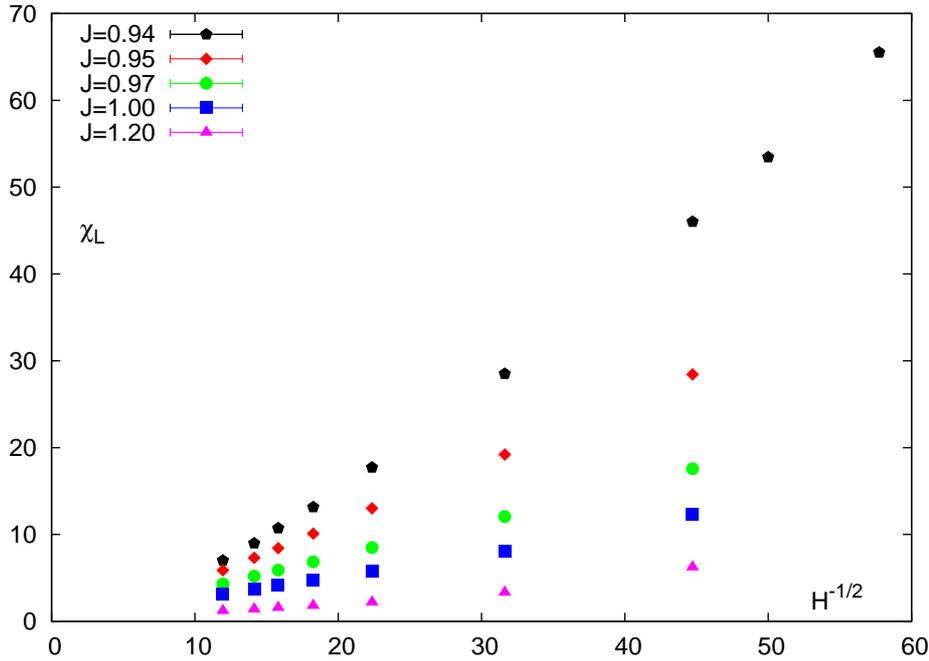


Abbildung 4.25: Das Verhalten der longitudinalen Suszeptibilität χ_L in Abhängigkeit von $H^{-1/2}$ für $J > J_c$.

gut erkennen, dass die Datenpunkte von χ_L für alle aufgetragenen Kopplungen J sehr schön dem vorhergesagten Verhalten im dargestellten Bereich folgen und damit die gefundene Abhängigkeit von $H^{-1/2}$ durch unsere Daten bestätigt werden kann.

Am kritischen Punkt zeigen die longitudinale und die transversale Suszeptibilität die gleiche H -Abhängigkeit, denn aus der bereits im Kapitel 4.2 für die Magnetisierung M nachgewiesenen Beziehung

$$M = B_c H^{1/\delta}$$

folgt für die Suszeptibilitäten

$$\chi_L = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{B_c}{\delta} H^{1/\delta-1} \quad \text{und} \quad \chi_T = \frac{M}{H} = B_c H^{1/\delta-1}. \quad (4.19)$$

Die Amplituden beider Suszeptibilitäten unterscheiden sich damit lediglich um einen Faktor δ , der sich aus dem Quotienten

$$\frac{\chi_T}{\chi_L} = \delta \quad (4.20)$$

leicht bestimmen lässt. Das Ergebnis zeigt Abbildung 4.26. Ein einfacher Geraden-

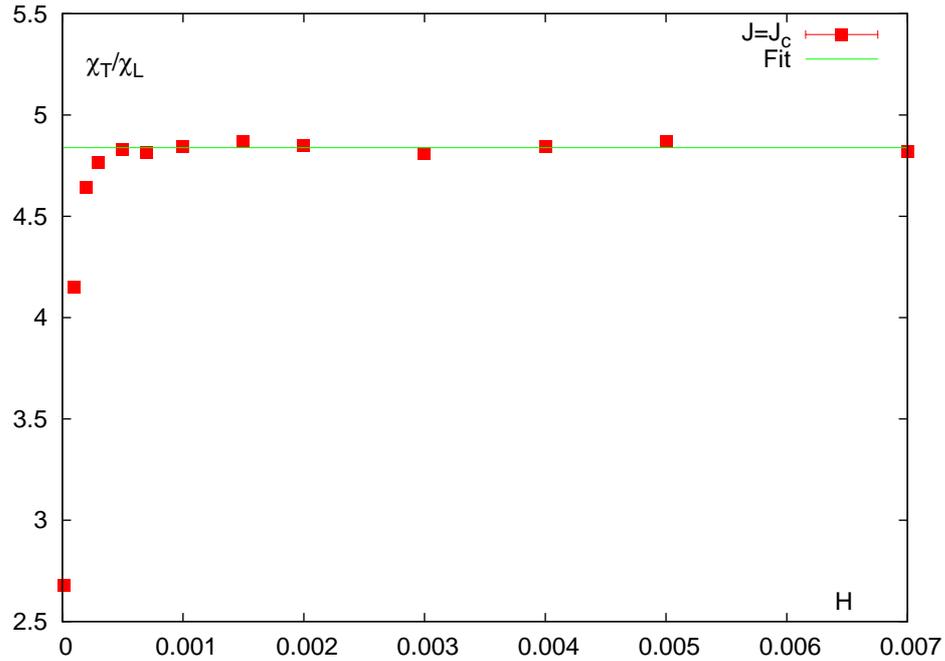


Abbildung 4.26: Quotient der transversalen und longitudinalen Suszeptibilität χ_T/χ_L zur Bestimmung des kritischen Exponenten δ in Abhängigkeit von H für $J = J_c$.

Fit, für den allerdings erst die von Finite-Size-Effekten freien Werte ab $H = 0.0005$ verwendet wurden, lieferte für den kritischen Exponenten δ den Wert

$$\delta = 4.821(5) \quad (4.21)$$

mit $\chi^2/dof \approx 1.08$. Dieses Resultat befindet sich in guter Übereinstimmung mit dem bereits in Kapitel 4.2 aus dem Verhalten der Magnetisierung ermittelten Wert.

Für den Bereich $J > J_c$ wollen wir uns an dieser Stelle nunmehr mit dem Versuch eines Nachweises der in [11] angegebenen PP-Formel (2.13)

$$G_L(\mathbf{x}) = \frac{N-1}{2M^2} G_T^2(\mathbf{x})$$

beschäftigen, deren Gültigkeitsbereich nach [11] auf die gebrochene Phase und für genügend kleine äußere Felder H vorhergesagt wird. Hierzu verwenden wir die im

Kapitel 2.5 gefundenen Ausdrücke für die longitudinale Suszeptibilität (2.87) und die longitudinale Zweiebenen-Korrelationsfunktion (2.89). Mit Hilfe der durch MEM gewonnenen transversalen Masse haben wir für alle untersuchten Kopplungen die Beziehung aus Gleichung (2.87) getestet. Zunächst kann festgestellt werden, dass keine Übereinstimmung im Bereich $J \leq J_c$, also für die symmetrische Phase, für alle untersuchten äußeren Felder gefunden werden konnte. Hier lagen die Resultate der Gleichungen (1.79) und (2.87) um mehr als einen Faktor 10^2 auseinander. Dieses Resultat ist im Hinblick auf die bei der Herleitung der PP-Formel (2.13) gemachten Annahmen nicht überraschend.

Im Bereich der gebrochenen Phase, also für die Kopplungen oberhalb J_c , zeigte sich dagegen ein anderes Bild, das in Abbildung 4.27 zu sehen ist. Hier ist zunächst

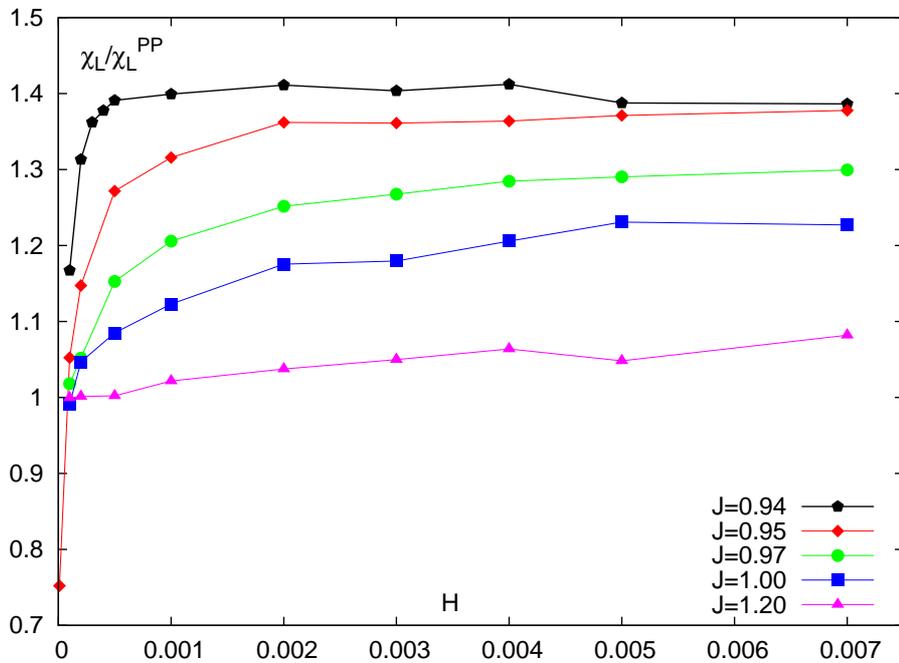


Abbildung 4.27: Der Quotient aus der gemessenen longitudinalen Suszeptibilität χ_L und der mit Hilfe der PP-Formel aus der transversalen Masse berechneten Suszeptibilität χ_L^{PP} in Abhängigkeit vom äußeren Feld H für $J > J_c$.

zu beobachten, dass die Übereinstimmung für steigende Kopplungsstärke und damit sinkende Temperatur deutlich zunimmt, also der Quotient aus der gemessenen longitudinalen Suszeptibilität χ_L und der mit Hilfe der PP-Formel aus der transversalen Masse berechneten Suszeptibilität χ_L^{PP} immer stärker beim Wert Eins liegt. Während bei der noch nahe am kritischen Punkt liegenden Kopplung $J = 0.94$ selbst beim kleinsten äußeren Feld eine deutliche Abweichung von ca. 6% erkennbar ist, kann bereits für die nächste Kopplung $J = 0.95$ eine verbesserte Übereinstimmung beider Suszeptibilitäten für das kleinste Feld gefunden werden. Hier beträgt

die Abweichung nur noch 2.8%. Diese Entwicklung setzt sich nun für $J = 0.97$ und $J = 1.00$ weiter fort, wobei für die zuletzt genannte Kopplung die Abweichung bereits nur noch 1% beträgt. Für die höchste Kopplung $J = 1.20$ beträgt der Unterschied weniger als 1%.

Mit ansteigendem äußeren Feld ergibt sich sehr schnell eine immer deutlichere Abweichung der gemessenen Suszeptibilität von Wert aus Gleichung (2.87). Beispielsweise ergibt sich bei der Kopplung $J = 0.97$ schon bei einem äußeren Feld $H = 0.001$ eine Abweichung von 17%. Wird das äußere Feld H weiter erhöht, dann steigt die Abweichung auf ca. 30% an. Auch dieser „Spitzenwert“ für die Abweichung beim größten Feld nimmt mit zunehmender Kopplungsstärke ab. Beträgt er bei $J = 0.94$ noch 40%, so erreicht er bei $J = 1.20$ nur noch einen Wert von 8%.

Anhand der Abbildungen 4.28 bis 4.32, in denen die gemessenen Zweiebenen-Korrelationsfunktionen (rote Punkte) zusammen mit dem Ergebnis aus der PP-Gleichung (2.89) (blaue Kreuze) für die entsprechende transversale Masse geplottet wurden, kann das für die longitudinale Suszeptibilität gefundene Verhalten am Beispiel für das äußere Feld $H = 0.0001$ für die Korrelationen sichtbar nachvollzogen werden.

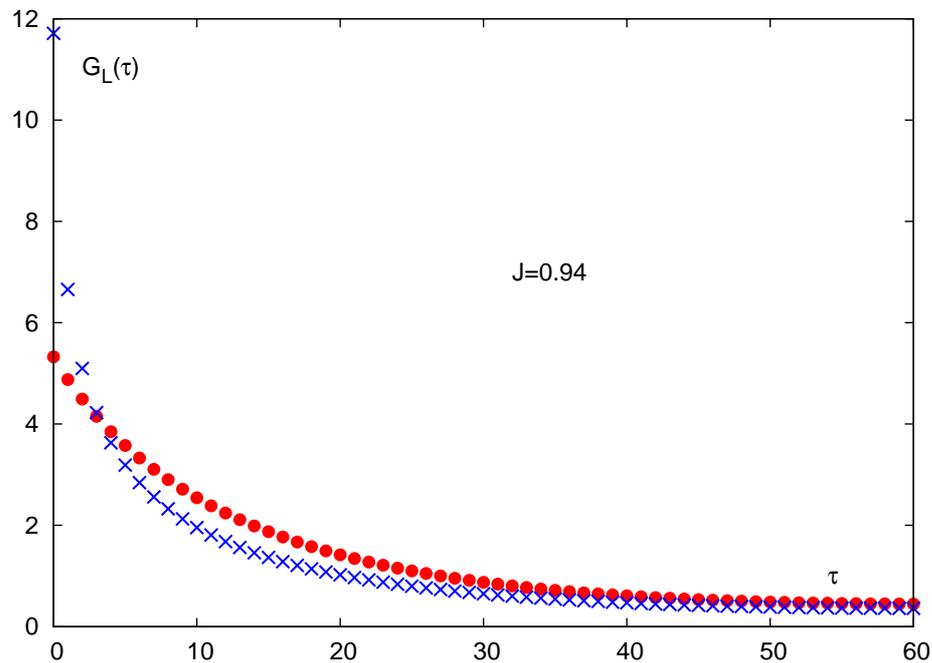


Abbildung 4.28: Vergleich der gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion $G_L(\tau)$ (rote Kreise) mit der PP-Formel (blaue Kreuze) für $J = 0.94$ und $H = 0.0001$.

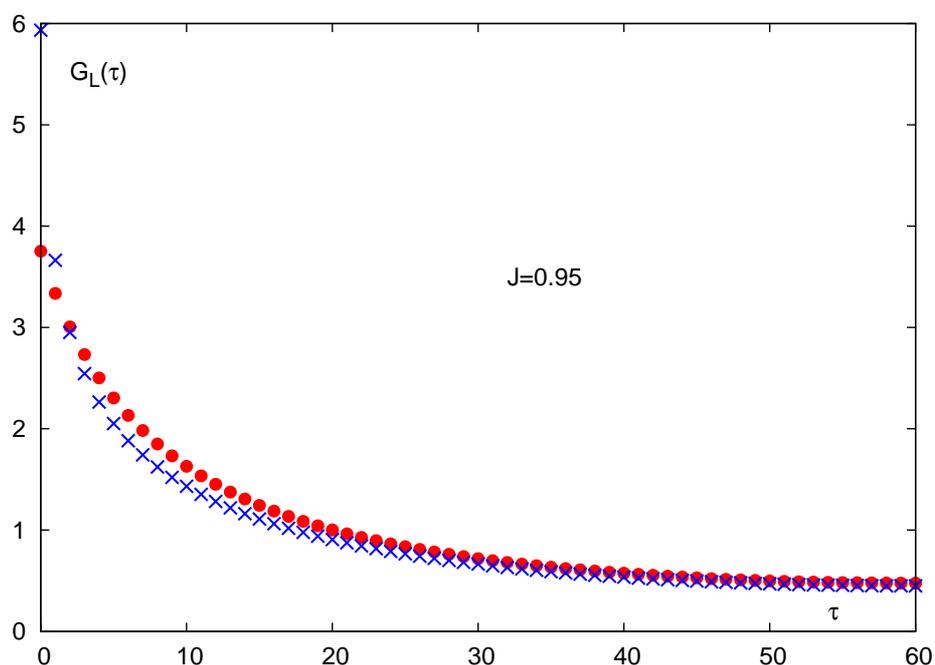


Abbildung 4.29: Vergleich der gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion $G_L(\tau)$ mit der PP-Formel für $J = 0.95$ und $H = 0.0001$.

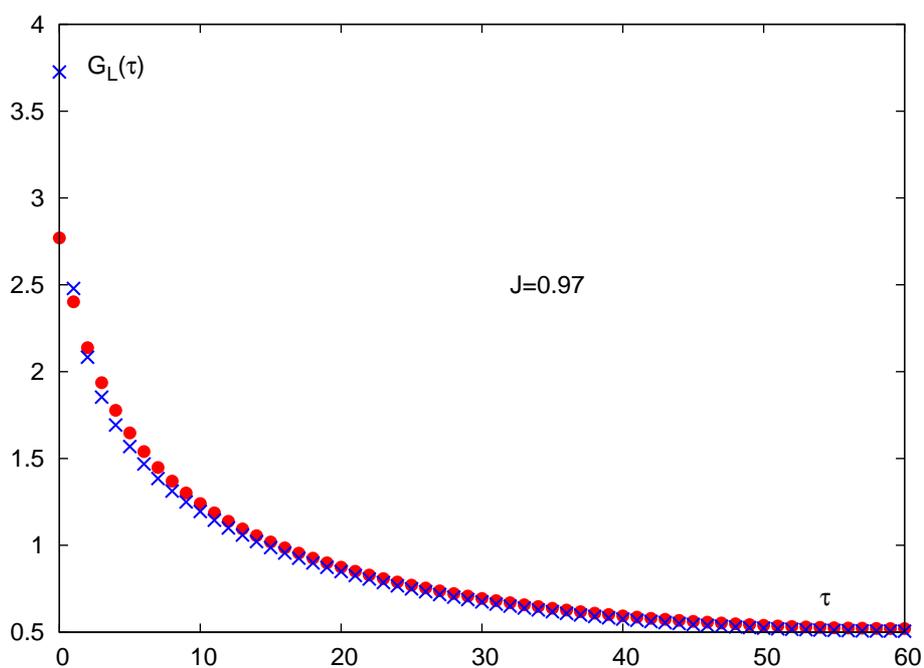


Abbildung 4.30: Vergleich der gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion $G_L(\tau)$ mit der PP-Formel für $J = 0.97$ und $H = 0.0001$.

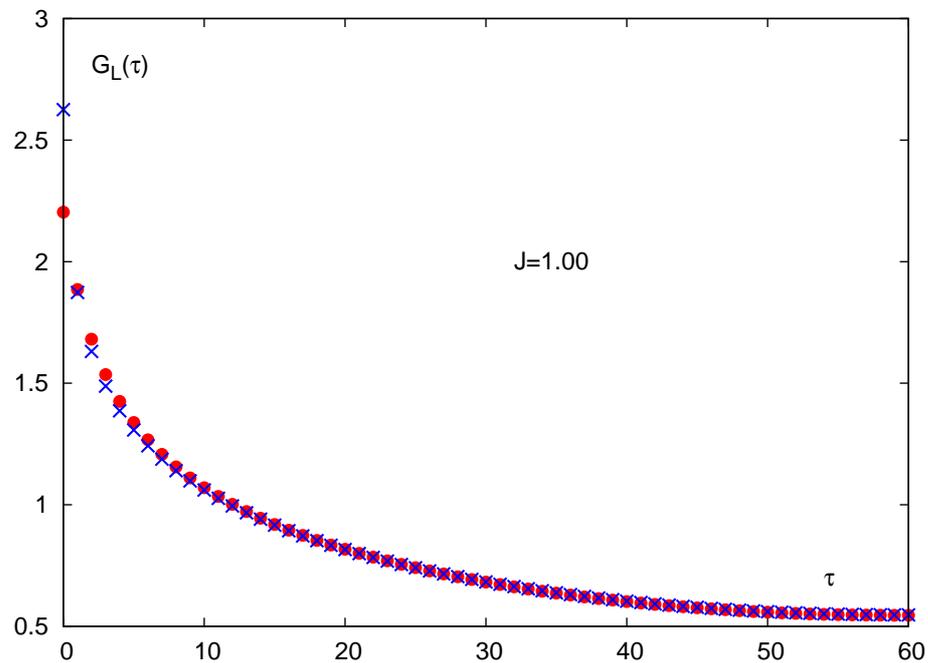


Abbildung 4.31: Vergleich der gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion $G_L(\tau)$ mit der PP-Formel für $J = 1.00$ und $H = 0.0001$.

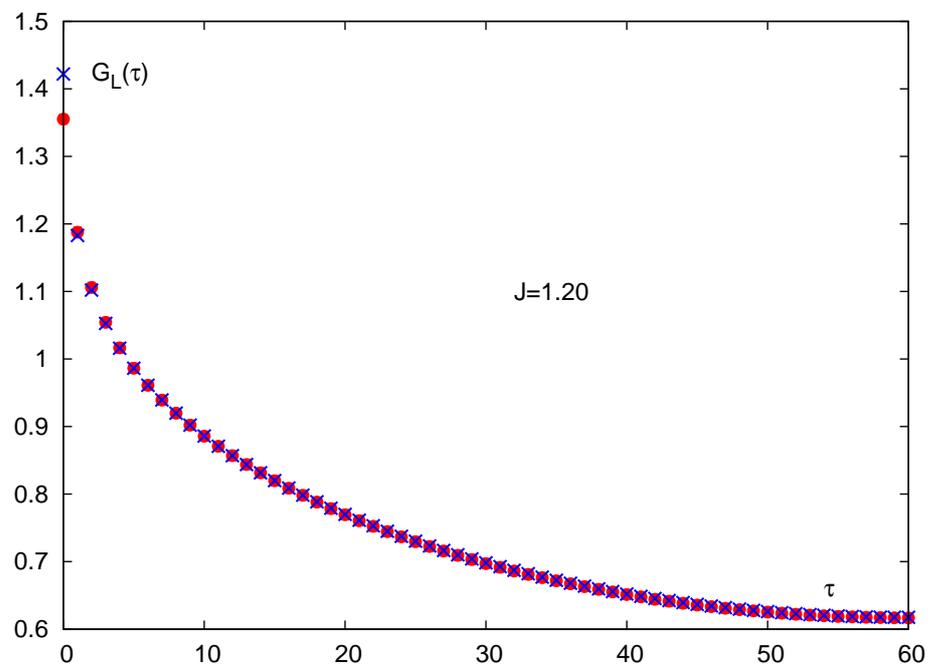


Abbildung 4.32: Vergleich der gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion $G_L(\tau)$ mit der PP-Formel für $J = 1.20$ und $H = 0.0001$.

Während bei der noch nahe am kritischen Punkt liegenden Kopplung $J = 0.94$ zwar eindeutig ein ähnliches Verhalten für die beiden Korrelationen zu sehen ist, sind selbst bei diesem kleinsten äußeren Feld deutliche Abweichungen unverkennbar vorhanden (Abbildung 4.28). Aber bereits für die nächste Kopplung $J = 0.95$ ist in Abbildung 4.28 eine deutlich verbesserte Übereinstimmung beider Korrelationen erkennbar. Diese Entwicklung setzt sich nun in den Abbildungen 4.30 für $J = 0.97$ und 4.31 für $J = 1.00$ weiter fort. Für unsere stärkste Kopplung $J = 1.20$, die der niedrigsten Temperatur entspricht und in Abbildung 4.32 dargestellt ist, kann bis auf den zu $\tau = 0$ gehörenden Wert innerhalb der Fehler ein gute Übereinstimmung der Korrelationsfunktionen gefunden werden.

Mit ansteigendem äußeren Feld ergibt sich, wie bereits in Abbildung 4.27 zu sehen war, eine geringer werdende Übereinstimmung für die Korrelationen. Beispielhaft ist für die Kopplung $J = 0.97$ zusätzlich einmal der Vergleich bei $H = 0.001$ in Abbildung 4.33 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass nunmehr die beiden Korrela-

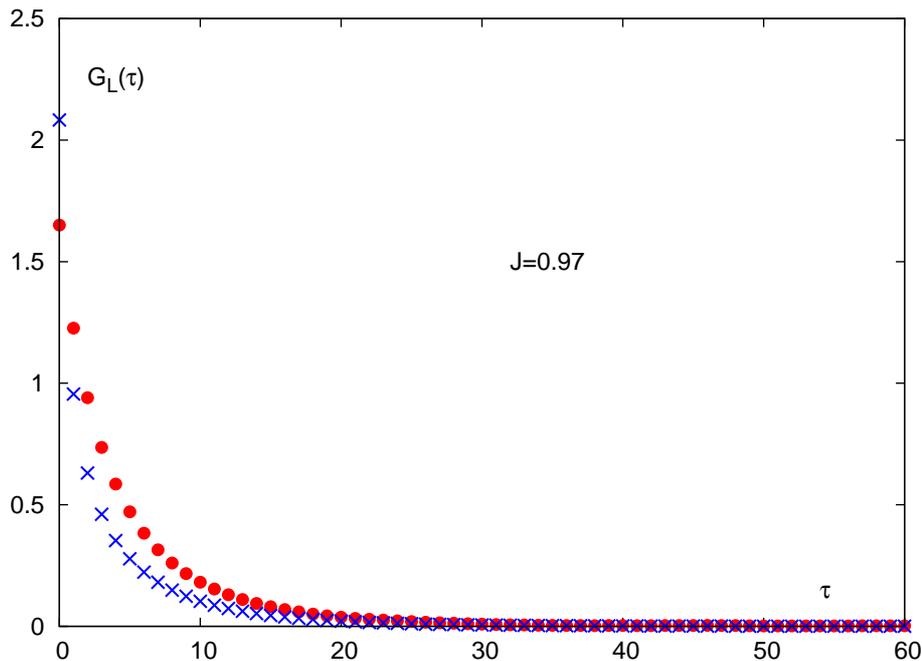


Abbildung 4.33: Vergleich der gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion $G_L(\tau)$ mit der PP-Formel für $J = 0.97$ und $H = 0.001$.

tionsfunktionen nicht mehr den beim kleinsten Feld gefundenen deckungsgleichen Verlauf zeigen, sondern deutliche Abweichungen besonders bei kleinen Abständen erkennen lassen.

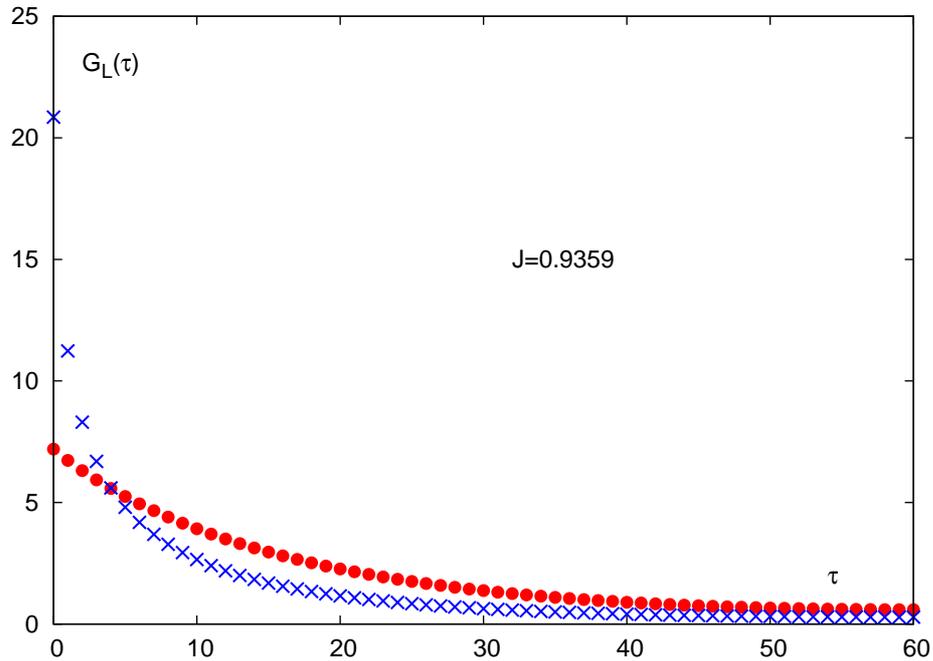


Abbildung 4.34: Vergleich der gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion $G_L(\tau)$ mit der PP-Formel für $J = J_c$ und $H = 0.0001$.

Der Vollständigkeit halber wird an dieser Stelle kurz noch einmal auf die kritische Kopplung eingegangen. Da für die Kopplung $J = 0.94$ bereits eine deutlich schlechtere Übereinstimmung nach der PP-Formel gefunden wurde, ist anzunehmen, dass die Abweichungen unter den Korrelationen für die kritische Kopplung $J = 0.9359$ noch deutlicher zu Tage treten werden, obwohl für die kritische Kopplung der Zusammenhang $m_L = 2m_T$ durch unsere vorherigen Untersuchungen bereits klar bestätigt werden konnte. In Abbildung 4.34 ist das Ergebnis für die kritische Isotherme bei $H = 0.0001$ dargestellt. Daraus ist das erwartete Verhalten einer etwas stärkeren Abweichung gegenüber Abbildung 4.28 zu erkennen.

Es bleibt abschließend festzuhalten, dass durch den Vergleich der direkt gemessenen longitudinalen Korrelationsfunktion mit der aus Gleichung (2.13) gewonnenen Korrelationsfunktion die Gültigkeit von Gleichung (2.13) für den Bereich kleiner Felder H und innerhalb der gebrochenen Phase klar bestätigt werden konnte. Da wir allerdings gerade in dem interessanten Bereich kleinster äußerer Felder nur für wenige H -Werte Simulationen durchgeführt haben, wäre eine zukünftige Untersuchung dieses Zusammenhangs gerade in diesem Magnetfeldbereich auf erheblich größeren Gittern von großem Interesse, um weitere Aufschlüsse zu erhalten.

4.4.4 Skalenfunktion der longitudinalen Korrelationslänge

In diesem letzten Abschnitt soll nun die Skalenfunktion der longitudinalen Korrelationslänge für das $O(4)$ -Modell dargestellt werden. Da sich die transversale und die longitudinale Korrelationslänge aufgrund des Goldstone-Effektes unterschiedlich verhalten, erwartet man natürlich verschiedene Skalenfunktionen g_ξ^T und g_ξ^L . Auch hierzu haben Engels et al. erstmals in [6] Untersuchungen durchgeführt, jedoch für die gebrochene Phase ($z < 0$) keinen eindeutigen Verlauf dieser Skalenfunktion finden können. Mit den von uns ermittelten Peaks für das Spektrum des longitudinalen Kanals am kritischen Punkt, in der gebrochenen und in der symmetrischen Phase lässt sich die Skalenfunktion g_ξ^L der longitudinalen Korrelationslänge des $O(4)$ -Modells unter der Annahme bestimmen, dass der erste Energiepeak des Spektrums, den wir als longitudinale Masse m_L betrachtet haben, das Inverse der Korrelationslänge ξ_L ist.

Der von uns in der gebrochenen Phase gefundene Energiesprung zwischen dem aussterbenden ersten Peak und dem ersten angeregten Zustand hat einen erheblichen Einfluss auf die Skalenfunktion in diesem Bereich. Für den anderen Temperaturbereich soll erneut eine Bestätigung und möglicherweise Verfeinerung der damaligen Ergebnisse durch unsere Untersuchungen erfolgen. Bei analoger Vorgehensweise wie in Kapitel 4.3.4 erhält man für die normierte Skalenfunktion der longitudinalen Korrelationslänge den Ausdruck

$$\hat{g}_\xi^L(z) = \frac{h^{\nu_c}}{g_\xi^L(0) m_L} \quad (4.22)$$

mit $g_\xi^L(0) = 0.223(2)$ [6]. Für $z \rightarrow \infty$ ergibt sich die gleiche asymptotische Form wie für den transversalen Fall in Gleichung (4.17). Zur Bestimmung der Skalenfunktion wurden alle in Tabelle 4.1 aufgeführten Parameterbereiche für die Kopplung J und das äußere Feld H verwendet, wobei die Ergebnisse für die Kopplung $J = 1.20$ keine Berücksichtigung fanden, da sie aufgrund ihrer zu großen Entfernung vom Nullpunkt mit Sicherheit nicht innerhalb des schon aus [6] bekannten Skalenbereichs liegen.

In Abbildung 4.35 ist der Verlauf der normierten Skalenfunktion der longitudinalen Korrelationslänge als Funktion von z zu sehen. Im Gegensatz zu \hat{g}_ξ^T ist für den longitudinalen Kanal im Bereich $J > J_c$, d.h. $z < 0$, kein eindeutiger Verlauf für eine Skalenfunktion zu erkennen. Zum einen macht sich der bereits eingangs erwähnte Gap im Massenspektrum beispielsweise für $J = 0.94$ derart bemerkbar, dass eine stetige und glatte Skalenfunktion \hat{g}_ξ^L nicht bestimmt werden kann. Dieser Effekt setzt sich auch für die anderen Kopplungen in der gebrochenen Phase fort. Außerdem skalieren die Daten in diesem Bereich nicht. Offenbar existiert für die gebrochene Phase keine Skalenfunktion für die longitudinale Korrelationslänge. Um den Sachverhalt für den Bereich $z < 0$ näher untersuchen zu können, wären zusätzliche Simulationen

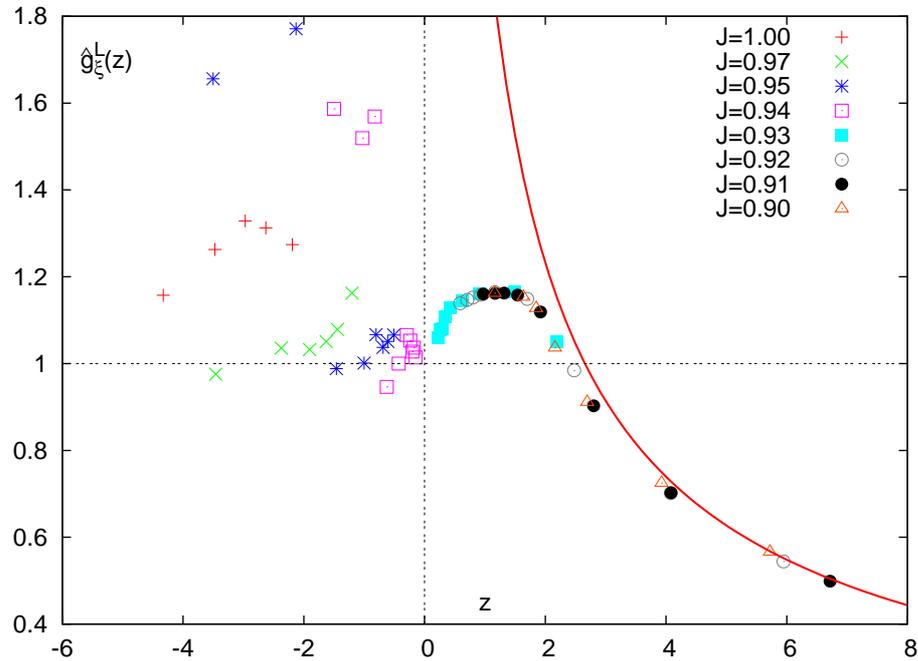


Abbildung 4.35: Die Skalenfunktion der longitudinalen Korrelationslänge $\hat{g}_\xi^L(z) = h^{\nu_c} / (g_\xi^L(0) m_L)$. Die durchgezogene Linie beschreibt die asymptotische Form nach Gleichung (4.17).

mit hoher Statistik auf wesentlich größeren Gittern erforderlich.

Für den Bereich der symmetrischen Phase ($z > 0$) zeigen allerdings alle aufgetragenen Datenpunkte das klare Bild einer Skalenfunktion, deren Verlauf ebenfalls mit der in [6] gezeigten Form und der ermittelten Position des Hochpunkts bei $z_P \approx 1.335$ überein stimmt, Aufgrund der von uns gewählten hohen Simulationsstatistik schwanken die Datenpunkte vor allem im Bereich nahe $z = 0$ merklich weniger als bei den damaligen Untersuchungen und liefern einen nahezu glatten Verlauf. Somit konnte die Darstellung des Verlaufs von \hat{g}_ξ^L durch unsere Daten qualitativ verbessert werden. Auch im longitudinalen Fall zeigt sich eine frühzeitige Annäherung der Datenpunkte an die asymptotische Form aus Gleichung (4.17).

Zusammenfassung

Zur Untersuchung der Spektralfunktionen des dreidimensionalen $O(4)$ -Spinmodells wurden in Abhängigkeit von der Kopplung J und dem äußeren Feld H auf einem kubischen Gitter der Ausdehnung $L = 120$ mit periodischen Randbedingungen Simulationen mit hoher Statistik durchgeführt. Anschließend wurden aus den gemessenen Zweiebenen-Korrelationsfunktionen mit Hilfe der Maximum Entropie Methode (MEM) die Spektralfunktionen für den transversalen und den longitudinalen Kanal gewonnen.

Der Ordnungsparameter M zeigte bei unseren Untersuchungen das bereits bekannte Verhalten für die einzelnen Temperatur- bzw. Kopplungsbereiche des Systems. Durch unsere hohe Statistik auf einem großen Gitter war es zudem möglich, die Werte für die kritischen Exponenten des dreidimensionalen $O(4)$ -Spinmodells zu verbessern. Darüber hinaus konnte durch das Verhalten der Magnetisierung gezeigt werden, dass auch bei diesem großen Gitter offensichtlich nach wie vor Finite-Size-Effekte für die kleinsten äußeren Felder H existieren.

Für das transversale Spektrum fanden wir stets genau einen scharfen Massenpeak. Bei allen untersuchten Kopplungen konnten weder höhere Zustände noch ein zusätzlicher Kontinuumsbeitrag verifiziert werden. Unsere Ergebnisse stehen damit in Einklang mit den bisherigen Annahmen, nach denen das Spektrum des transversalen Kanals die des Gaußschen Modells ist. Mit diesem Ergebnis und dem Ansatz, dass die transversale Masse nur einen Pol besitzt, konnten die transversalen Korrelationsfunktionen sehr gut rekonstruiert werden. Untersuchungen zur Stiffness als Maß für die Abweichung des Quadrats der transversalen Masse vom Wert der inversen transversalen Suszeptibilität ergaben in der symmetrischen Phase ($T > T_c$) in guter Näherung das in [11] vorhergesagte Verhalten mit $c_s = 1$. Bei Annäherung an den kritischen Punkt beobachteten wir zunehmend Einflüsse der gebrochenen Phase ($T < T_c$), während nach Überschreitung der kritischen Kopplung $c_s > 1$ wird. Abschließend war es möglich, durch direkte Verwendung der transversalen Masse die Skalenfunktion g_ξ^T in deutlich verbesserter Qualität gegenüber bisherigen Untersuchungen zu bestimmen.

Im longitudinalen Kanal konnten zunächst durch die MEM-Analyse neben einem Grundzustand weitere bisher unbekannte angeregte Energiezustände gefunden werden, die ein unterschiedliches Verhalten in den einzelnen Phasen des Systems zeigten. Entgegen den Vorhersagen des Default-Modells fanden wir kein Kontinuum ab $\omega = 2m_T$. Während in der gebrochenen Phase der niedrigste Zustand bei einem bestimmten Wert des äußeren Feldes verschwand und der erste angeregte Zustand ab diesem Punkt und damit erst für größere Felder H eine starke Annäherung an die doppelte transversale Masse zeigte und bei großen Feldern diese auch erreichte, konnten wir durch Untersuchungen am kritischen Punkt die Beziehung $m_L = 2m_T$ klar bestätigen. In der symmetrischen Phase zeigte sich mit zunehmender Temperatur, dass höhere Zustände im Spektrum nicht mehr nachgewiesen werden konnten. Der Grundzustand erreichte in Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen im Limes $H \rightarrow 0$ stets die einfache transversale Masse, während er für ansteigendes Feld gegen $2m_T$ strebte. Durch theoretische Überlegungen zum Verhalten der longitudinalen Suszeptibilität konnte ein Test der Patashinskii-Pokrovskii-Formel [11] zur Beziehung zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion durchgeführt werden. Dabei war es möglich, den vorhergesagten Gültigkeitsbereich für kleine äußere Felder in der gebrochenen Phase zu bestätigen. Mit den zur Verfügung stehenden Daten über das niedrigste Niveau des longitudinalen Spektrums konnte der Verlauf der Skalenfunktion g_ξ^L mit unterschiedlichem Erfolg berechnet werden. Während für den Bereich $z > 0$ die Skalenfunktion sehr gut ermittelt werden konnte, war im Gegensatz zum transversalen Kanal für den Bereich $z < 0$ keine Skalenfunktion definierbar, da dort einerseits aufgrund des Energiegaps innerhalb jeder Kopplung wegen des Aussterbens des Grundzustandes und andererseits durch die unterschiedliche Lage der Datenpunkte verschiedener Kopplungen zueinander keine skalierenden Werte vorlagen.

Als wichtigste Fragen aus dieser Arbeit bleiben zum einen die Erklärung des im longitudinalen Kanals für die gebrochene Phase gefundenen Verschwindens des niedrigsten Zustandes offen. Eine analytische Berechnung der Energieniveaus für $T < T_c$ wäre hier zur Klärung wünschenswert. Darüber hinaus wäre zur Vertiefung der von uns erstmals durchgeführten Analyse der Beziehung zwischen longitudinaler und transversaler Korrelationsfunktion in der gebrochenen Phase für möglichst kleine Felder aus sehr viel größeren Gittern hilfreich.

Anhang A

Tabellen

A.1 Messwerte für die Magnetisierung M

J	H	M
0.9359	0.00001	0.0344340(1095)
	0.0001	0.1053053(387)
	0.0002	0.1230635(400)
	0.0003	0.1341401(277)
	0.0005	0.1492521(228)
	0.0007	0.1600315(209)
	0.0010	0.1723128(117)
	0.0015	0.1874034(159)
	0.0020	0.1989070(113)
	0.0030	0.2163277(94)
	0.0040	0.2295827(70)
	0.0050	0.2404124(66)
	0.0070	0.2577096(80)

Tabelle A.1: Messwerte der Magnetisierung für $J = J_c$.

J	H	M
0.85	0.0001	0.0007560(330)
	0.0002	0.0014220(196)
	0.0005	0.0036091(107)
	0.0010	0.0072611(82)
	0.0020	0.0144520(99)
	0.0030	0.0216660(143)
	0.0040	0.0288311(75)
	0.0050	0.0359150(63)
	0.0070	0.0498703(46)
0.90	0.0001	0.0025389(182)
	0.0002	0.0051050(178)
	0.0005	0.0128274(239)
	0.0010	0.0254569(118)
	0.0020	0.0496493(84)
	0.0030	0.0717030(117)
	0.0040	0.0913544(103)
	0.0050	0.1087428(133)
	0.0070	0.1377119(94)
0.91	0.0001	0.0040876(192)
	0.0002	0.0082720(348)
	0.0005	0.0205320(206)
	0.0010	0.0401871(174)
	0.0020	0.0747169(145)
	0.0030	0.1024716(126)
	0.0040	0.1246525(163)
	0.0050	0.1427992(105)
	0.0070	0.1710798(74)
0.92	0.00001	0.0007824(299)
	0.0001	0.0084416(249)
	0.0002	0.0168462(433)
	0.0005	0.0404883(217)
	0.0010	0.0732676(208)
	0.0020	0.1171891(154)
	0.0030	0.1453341(141)
	0.0040	0.1657277(97)
	0.0050	0.1817304(112)
0.0070	0.2061101(98)	
0.93	0.0001	0.0339843(751)
	0.0002	0.0591679(525)
	0.0005	0.1011724(296)
	0.0010	0.1349889(237)
	0.0020	0.1699997(144)
	0.0030	0.1914269(103)
	0.0040	0.2071883(86)
	0.0050	0.2198006(101)
	0.0070	0.2394985(94)

Tabelle A.2: Messwerte der Magnetisierung für $J < J_c$.

J	H	M
0.94	0.0001	0.1466963(446)
	0.0002	0.1584699(270)
	0.0003	0.1660059(161)
	0.0004	0.1719155(82)
	0.0005	0.1768726(194)
	0.0010	0.1948144(157)
	0.0020	0.2170207(107)
	0.0030	0.2322095(73)
	0.0040	0.2440196(83)
	0.0050	0.2538268(54)
0.0070	0.2696732(53)	
0.95	0.00001	0.1356437(1584)
	0.0001	0.2089014(392)
	0.0002	0.2167647(217)
	0.0005	0.2279264(123)
	0.0010	0.2394332(146)
	0.0020	0.2550127(81)
	0.0030	0.2663958(82)
	0.0040	0.2756142(90)
	0.0050	0.2834574(71)
	0.0070	0.2964735(45)
0.97	0.0001	0.2822284(324)
	0.0002	0.2883468(156)
	0.0005	0.2955745(114)
	0.0010	0.3026861(98)
	0.0020	0.3126017(72)
	0.0030	0.3202183(43)
	0.0040	0.3265725(52)
	0.0050	0.3321325(52)
	0.0070	0.3416229(63)
1.00	0.0001	0.3515620(292)
	0.0002	0.3569436(305)
	0.0005	0.3624719(78)
	0.0010	0.3673597(75)
	0.0020	0.3740851(58)
	0.0030	0.3793020(64)
	0.0040	0.3837240(53)
	0.0050	0.3876445(37)
	0.0070	0.3944285(42)
1.20	0.0001	0.5555108(317)
	0.0002	0.5601733(403)
	0.0005	0.5637332(112)
	0.0010	0.5659121(51)
	0.0020	0.5685456(56)
	0.0030	0.5705220(31)
	0.0040	0.5721847(27)
	0.0050	0.5736667(25)
	0.0070	0.5762482(18)

Tabelle A.3: Messwerte der Magnetisierung für $J > J_c$.

A.2 Messwerte für die Suszeptibilitäten

J	H	χ_T	$\Delta\chi_T$	χ_L	$\Delta\chi_L$
0.90	0.0001	$2.5403 \cdot 10^1$	$3.1962 \cdot 10^{-1}$	$2.5046 \cdot 10^1$	$2.4877 \cdot 10^{-1}$
	0.0002	$2.5831 \cdot 10^1$	$3.4923 \cdot 10^{-1}$	$2.5492 \cdot 10^1$	$2.0295 \cdot 10^{-1}$
	0.0005	$2.5505 \cdot 10^1$	$1.1526 \cdot 10^{-1}$	$2.5480 \cdot 10^1$	$1.9233 \cdot 10^{-1}$
	0.001	$2.5493 \cdot 10^1$	$1.3740 \cdot 10^{-1}$	$2.4943 \cdot 10^1$	$1.4127 \cdot 10^{-1}$
	0.002	$2.4722 \cdot 10^1$	$8.7731 \cdot 10^{-2}$	$2.3141 \cdot 10^1$	$1.0087 \cdot 10^{-1}$
	0.003	$2.3975 \cdot 10^1$	$4.8330 \cdot 10^{-2}$	$2.1018 \cdot 10^1$	$1.1292 \cdot 10^{-1}$
	0.004	$2.2772 \cdot 10^1$	$5.2817 \cdot 10^{-2}$	$1.8481 \cdot 10^1$	$7.7657 \cdot 10^{-2}$
	0.005	$2.1806 \cdot 10^1$	$2.0996 \cdot 10^{-2}$	$1.6442 \cdot 10^1$	$6.3456 \cdot 10^{-2}$
	0.007	$1.9629 \cdot 10^1$	$3.4213 \cdot 10^{-2}$	$1.2824 \cdot 10^1$	$6.2121 \cdot 10^{-2}$
0.91	0.0001	$4.1499 \cdot 10^1$	$3.1353 \cdot 10^{-1}$	$4.1532 \cdot 10^1$	$4.1881 \cdot 10^{-1}$
	0.0002	$4.1254 \cdot 10^1$	$3.1739 \cdot 10^{-1}$	$4.0981 \cdot 10^1$	$3.8430 \cdot 10^{-1}$
	0.0005	$4.1089 \cdot 10^1$	$1.9487 \cdot 10^{-1}$	$4.0553 \cdot 10^1$	$2.2295 \cdot 10^{-1}$
	0.001	$4.0393 \cdot 10^1$	$1.3381 \cdot 10^{-1}$	$3.7933 \cdot 10^1$	$1.8534 \cdot 10^{-1}$
	0.002	$3.7069 \cdot 10^1$	$7.1861 \cdot 10^{-2}$	$3.1220 \cdot 10^1$	$1.2987 \cdot 10^{-1}$
	0.003	$3.4220 \cdot 10^1$	$1.0531 \cdot 10^{-1}$	$2.4735 \cdot 10^1$	$9.5005 \cdot 10^{-2}$
	0.004	$3.1368 \cdot 10^1$	$9.2537 \cdot 10^{-2}$	$1.9835 \cdot 10^1$	$9.6014 \cdot 10^{-2}$
	0.005	$2.8585 \cdot 10^1$	$8.5902 \cdot 10^{-2}$	$1.6702 \cdot 10^1$	$1.0808 \cdot 10^{-1}$
	0.007	$2.4427 \cdot 10^1$	$8.9722 \cdot 10^{-2}$	$1.2123 \cdot 10^1$	$3.9045 \cdot 10^{-2}$
0.92	0.00001	$8.4179 \cdot 10^1$	$3.4587 \cdot 10^{-1}$	$8.4135 \cdot 10^1$	$8.1592 \cdot 10^{-1}$
	0.0001	$8.3822 \cdot 10^1$	$3.5026 \cdot 10^{-1}$	$8.3128 \cdot 10^1$	$6.4604 \cdot 10^{-1}$
	0.0002	$8.3384 \cdot 10^1$	$3.5907 \cdot 10^{-1}$	$8.2373 \cdot 10^1$	$4.4168 \cdot 10^{-1}$
	0.0005	$8.0751 \cdot 10^1$	$3.6094 \cdot 10^{-1}$	$7.4477 \cdot 10^1$	$3.8265 \cdot 10^{-1}$
	0.001	$7.3183 \cdot 10^1$	$2.4633 \cdot 10^{-1}$	$5.6495 \cdot 10^1$	$2.2783 \cdot 10^{-1}$
	0.002	$5.8579 \cdot 10^1$	$1.7361 \cdot 10^{-1}$	$3.4080 \cdot 10^1$	$2.0619 \cdot 10^{-1}$
	0.003	$4.8466 \cdot 10^1$	$9.7070 \cdot 10^{-2}$	$2.3619 \cdot 10^1$	$1.0368 \cdot 10^{-1}$
	0.004	$4.1537 \cdot 10^1$	$1.8107 \cdot 10^{-1}$	$1.7697 \cdot 10^1$	$6.0573 \cdot 10^{-2}$
	0.005	$3.6196 \cdot 10^1$	$8.0233 \cdot 10^{-2}$	$1.4376 \cdot 10^1$	$6.7891 \cdot 10^{-2}$
0.007	$2.9541 \cdot 10^1$	$6.9120 \cdot 10^{-2}$	$1.0436 \cdot 10^1$	$4.7774 \cdot 10^{-2}$	
0.93	0.0001	$3.3899 \cdot 10^2$	$1.2612 \cdot 10^0$	$3.0221 \cdot 10^2$	$1.2195 \cdot 10^0$
	0.0002	$2.9667 \cdot 10^2$	$9.3305 \cdot 10^{-1}$	$2.1137 \cdot 10^2$	$8.7183 \cdot 10^{-1}$
	0.0005	$2.0252 \cdot 10^2$	$4.9847 \cdot 10^{-1}$	$9.6247 \cdot 10^1$	$3.8069 \cdot 10^{-1}$
	0.001	$1.3485 \cdot 10^2$	$3.7917 \cdot 10^{-1}$	$4.9315 \cdot 10^1$	$1.4517 \cdot 10^{-1}$
	0.002	$8.4643 \cdot 10^1$	$1.7985 \cdot 10^{-1}$	$2.6005 \cdot 10^1$	$1.3211 \cdot 10^{-1}$
	0.003	$6.3999 \cdot 10^1$	$2.0266 \cdot 10^{-1}$	$1.7979 \cdot 10^1$	$1.1561 \cdot 10^{-1}$
	0.004	$5.1739 \cdot 10^1$	$1.4749 \cdot 10^{-1}$	$1.3950 \cdot 10^1$	$6.9670 \cdot 10^{-2}$
	0.005	$4.3658 \cdot 10^1$	$9.5823 \cdot 10^{-2}$	$1.1442 \cdot 10^1$	$6.5733 \cdot 10^{-2}$
	0.007	$3.4292 \cdot 10^1$	$9.9570 \cdot 10^{-2}$	$8.5473 \cdot 10^0$	$3.7113 \cdot 10^{-2}$

Tabelle A.4: Transversale und longitudinale Suszeptibilität für $J < J_c$.

J	H	χ_T	$\Delta\chi_T$	χ_L	$\Delta\chi_L$
0.9359	0.00001	$3.4404 \cdot 10^3$	$5.8073 \cdot 10^0$	$2.9261 \cdot 10^3$	$1.6894 \cdot 10^1$
	0.0001	$1.0493 \cdot 10^3$	$2.4146 \cdot 10^0$	$2.5298 \cdot 10^2$	$1.0296 \cdot 10^0$
	0.0002	$6.1423 \cdot 10^2$	$1.7633 \cdot 10^0$	$1.3233 \cdot 10^2$	$6.4407 \cdot 10^{-1}$
	0.0003	$4.4789 \cdot 10^2$	$9.2920 \cdot 10^{-1}$	$9.4025 \cdot 10^1$	$4.0367 \cdot 10^{-1}$
	0.0005	$2.9885 \cdot 10^2$	$9.7740 \cdot 10^{-1}$	$6.1858 \cdot 10^1$	$3.6812 \cdot 10^{-1}$
	0.0007	$2.2790 \cdot 10^2$	$6.5007 \cdot 10^{-1}$	$4.7326 \cdot 10^1$	$2.1202 \cdot 10^{-1}$
	0.001	$1.7300 \cdot 10^2$	$5.1043 \cdot 10^{-1}$	$3.5723 \cdot 10^1$	$9.5650 \cdot 10^{-2}$
	0.0015	$1.2471 \cdot 10^2$	$2.5773 \cdot 10^{-1}$	$2.5966 \cdot 10^1$	$6.5871 \cdot 10^{-2}$
	0.002	$9.9431 \cdot 10^1$	$2.4131 \cdot 10^{-1}$	$2.0559 \cdot 10^1$	$9.4103 \cdot 10^{-2}$
	0.003	$7.2233 \cdot 10^1$	$2.4589 \cdot 10^{-1}$	$1.5015 \cdot 10^1$	$8.8654 \cdot 10^{-2}$
	0.004	$5.7258 \cdot 10^1$	$1.4433 \cdot 10^{-1}$	$1.1819 \cdot 10^1$	$6.4692 \cdot 10^{-2}$
	0.005	$4.8152 \cdot 10^1$	$1.2574 \cdot 10^{-1}$	$9.8895 \cdot 10^0$	$2.2639 \cdot 10^{-2}$
	0.007	$3.6691 \cdot 10^1$	$8.0793 \cdot 10^{-2}$	$7.6153 \cdot 10^0$	$2.7850 \cdot 10^{-2}$

Tabelle A.5: Transversale und longitudinale Suszeptibilität für $J = J_c$.

J	H	χ_T	$\Delta\chi_T$	χ_L	$\Delta\chi_L$	
0.94	0.0001	$1.4598 \cdot 10^3$	$5.5573 \cdot 10^0$	$1.6994 \cdot 10^2$	$1.6992 \cdot 10^0$	
	0.0002	$7.9028 \cdot 10^2$	$3.0224 \cdot 10^0$	$8.8703 \cdot 10^1$	$5.0624 \cdot 10^{-1}$	
	0.0003	$5.5636 \cdot 10^2$	$1.2164 \cdot 10^0$	$6.5541 \cdot 10^1$	$3.6139 \cdot 10^{-1}$	
	0.0004	$4.2881 \cdot 10^2$	$1.2330 \cdot 10^0$	$5.3433 \cdot 10^1$	$1.2838 \cdot 10^{-1}$	
	0.0005	$3.5426 \cdot 10^2$	$9.2593 \cdot 10^{-1}$	$4.6033 \cdot 10^1$	$2.0655 \cdot 10^{-1}$	
	0.001	$1.9467 \cdot 10^2$	$5.0284 \cdot 10^{-1}$	$2.8507 \cdot 10^1$	$1.1816 \cdot 10^{-1}$	
	0.002	$1.0804 \cdot 10^2$	$2.8465 \cdot 10^{-1}$	$1.7723 \cdot 10^1$	$7.7847 \cdot 10^{-2}$	
	0.003	$7.7249 \cdot 10^1$	$2.5185 \cdot 10^{-1}$	$1.3149 \cdot 10^1$	$6.9188 \cdot 10^{-2}$	
	0.004	$6.0960 \cdot 10^1$	$1.3475 \cdot 10^{-1}$	$1.0729 \cdot 10^1$	$4.4253 \cdot 10^{-2}$	
	0.005	$5.0827 \cdot 10^1$	$1.8853 \cdot 10^{-1}$	$8.9818 \cdot 10^0$	$5.5176 \cdot 10^{-2}$	
	0.007	$3.8775 \cdot 10^1$	$7.5221 \cdot 10^{-2}$	$7.0116 \cdot 10^0$	$3.2294 \cdot 10^{-2}$	
0.95	0.00001	$1.3572 \cdot 10^4$	$2.0969 \cdot 10^1$	$6.5716 \cdot 10^3$	$1.8557 \cdot 10^1$	
	0.0001	$2.0892 \cdot 10^3$	$8.3847 \cdot 10^0$	$1.2281 \cdot 10^2$	$1.1898 \cdot 10^0$	
	0.0002	$1.0781 \cdot 10^3$	$4.5647 \cdot 10^0$	$5.4168 \cdot 10^1$	$2.5470 \cdot 10^{-1}$	
	0.0005	$4.5546 \cdot 10^2$	$9.0570 \cdot 10^{-1}$	$2.8433 \cdot 10^1$	$1.0834 \cdot 10^{-1}$	
	0.001	$2.3874 \cdot 10^2$	$7.8273 \cdot 10^{-1}$	$1.9212 \cdot 10^1$	$7.7419 \cdot 10^{-2}$	
	0.002	$1.2746 \cdot 10^2$	$2.9869 \cdot 10^{-1}$	$1.3016 \cdot 10^1$	$5.0108 \cdot 10^{-2}$	
	0.003	$8.8651 \cdot 10^1$	$1.9749 \cdot 10^{-1}$	$1.0103 \cdot 10^1$	$5.4277 \cdot 10^{-2}$	
	0.004	$6.9168 \cdot 10^1$	$2.3898 \cdot 10^{-1}$	$8.4217 \cdot 10^0$	$3.2848 \cdot 10^{-2}$	
	0.005	$5.6707 \cdot 10^1$	$1.7269 \cdot 10^{-1}$	$7.3028 \cdot 10^0$	$3.4639 \cdot 10^{-2}$	
	0.007	$4.2523 \cdot 10^1$	$8.3860 \cdot 10^{-2}$	$5.8872 \cdot 10^0$	$2.2116 \cdot 10^{-2}$	
	0.97	0.0001	$2.8147 \cdot 10^3$	$9.3557 \cdot 10^0$	$1.0525 \cdot 10^2$	$9.5583 \cdot 10^{-1}$
0.0002		$1.4313 \cdot 10^3$	$5.4873 \cdot 10^0$	$3.8532 \cdot 10^1$	$2.3818 \cdot 10^{-1}$	
0.0005		$5.9563 \cdot 10^2$	$2.4322 \cdot 10^0$	$1.7561 \cdot 10^1$	$1.3392 \cdot 10^{-1}$	
0.001		$3.0037 \cdot 10^2$	$1.3184 \cdot 10^0$	$1.2051 \cdot 10^1$	$5.9686 \cdot 10^{-2}$	
0.002		$1.5568 \cdot 10^2$	$5.5083 \cdot 10^{-1}$	$8.4960 \cdot 10^0$	$3.8018 \cdot 10^{-2}$	
0.003		$1.0657 \cdot 10^2$	$3.2379 \cdot 10^{-1}$	$6.8591 \cdot 10^0$	$4.1118 \cdot 10^{-2}$	
0.004		$8.1601 \cdot 10^1$	$3.4743 \cdot 10^{-1}$	$5.8992 \cdot 10^0$	$1.6439 \cdot 10^{-2}$	
0.005		$6.6649 \cdot 10^1$	$1.3431 \cdot 10^{-1}$	$5.2006 \cdot 10^0$	$2.5577 \cdot 10^{-2}$	
0.007		$4.8624 \cdot 10^1$	$1.3899 \cdot 10^{-1}$	$4.3146 \cdot 10^0$	$1.7957 \cdot 10^{-2}$	
1.00		0.0001	$3.5041 \cdot 10^3$	$1.0541 \cdot 10^1$	$9.6437 \cdot 10^1$	$1.0968 \cdot 10^0$
		0.0002	$1.7853 \cdot 10^3$	$1.0972 \cdot 10^1$	$3.2876 \cdot 10^1$	$3.3100 \cdot 10^{-1}$
	0.0005	$7.2598 \cdot 10^2$	$1.7882 \cdot 10^{-1}$	$1.2369 \cdot 10^1$	$5.4373 \cdot 10^{-2}$	
	0.001	$3.6645 \cdot 10^2$	$8.9080 \cdot 10^{-1}$	$8.0994 \cdot 10^0$	$3.8843 \cdot 10^{-2}$	
	0.002	$1.8624 \cdot 10^2$	$8.4590 \cdot 10^{-1}$	$5.7978 \cdot 10^0$	$2.2531 \cdot 10^{-2}$	
	0.003	$1.2679 \cdot 10^2$	$4.9183 \cdot 10^{-1}$	$4.7289 \cdot 10^0$	$2.3434 \cdot 10^{-2}$	
	0.004	$9.6362 \cdot 10^1$	$3.9933 \cdot 10^{-1}$	$4.1322 \cdot 10^0$	$1.0732 \cdot 10^{-2}$	
	0.005	$7.7341 \cdot 10^1$	$2.4708 \cdot 10^{-1}$	$3.7433 \cdot 10^0$	$1.9785 \cdot 10^{-2}$	
	0.007	$5.6245 \cdot 10^1$	$2.4296 \cdot 10^{-1}$	$3.1191 \cdot 10^0$	$1.5567 \cdot 10^{-2}$	
	1.20	0.0001	$5.5762 \cdot 10^3$	$1.9175 \cdot 10^1$	$9.1076 \cdot 10^1$	$7.5957 \cdot 10^{-1}$
		0.0002	$2.8111 \cdot 10^3$	$2.3552 \cdot 10^1$	$2.5285 \cdot 10^1$	$6.2048 \cdot 10^{-1}$
0.0005		$1.1150 \cdot 10^3$	$5.3517 \cdot 10^0$	$6.2330 \cdot 10^0$	$4.0118 \cdot 10^{-2}$	
0.001		$5.6370 \cdot 10^2$	$3.2331 \cdot 10^0$	$3.3172 \cdot 10^0$	$2.4542 \cdot 10^{-2}$	
0.002		$2.8446 \cdot 10^2$	$1.2348 \cdot 10^0$	$2.1960 \cdot 10^0$	$1.0145 \cdot 10^{-2}$	
0.003		$1.8917 \cdot 10^2$	$8.7393 \cdot 10^{-1}$	$1.7961 \cdot 10^0$	$1.1235 \cdot 10^{-2}$	
0.004		$1.4294 \cdot 10^2$	$7.3483 \cdot 10^{-1}$	$1.5607 \cdot 10^0$	$5.4417 \cdot 10^{-3}$	
0.005		$1.1386 \cdot 10^2$	$3.5549 \cdot 10^{-1}$	$1.4007 \cdot 10^0$	$3.7770 \cdot 10^{-3}$	
0.007		$8.2539 \cdot 10^1$	$4.3383 \cdot 10^{-1}$	$1.2032 \cdot 10^0$	$4.7571 \cdot 10^{-3}$	

Tabelle A.6: Transversale und longitudinale Suszeptibilität für $J > J_c$.

A.3 Transversale und longitudinale Spektraldaten

J	H	$\sqrt{\frac{H}{M}}$	m_T	m_L	m_{L^*}	$\sqrt{c_s}$
0.90	0.0001	0.198462	0.200514	0.200521		0.990(5)
	0.0002	0.198933	0.200528	0.201476		0.992(5)
	0.0005	0.197434	0.200531	0.204485		0.985(5)
	0.0010	0.198197	0.200535	0.209497		0.988(5)
	0.0020	0.200706	0.200901	0.216513		0.999(5)
	0.0030	0.204546	0.204485	0.221476		1.000(4)
	0.0040	0.209250	0.209191	0.234479		1.000(4)
	0.0050	0.214432	0.214503	0.248467		1.000(4)
	0.0070	0.225458	0.225482	0.277486		1.000(4)
0.91	0.0001	0.156410	0.157514	0.157516		0.993(8)
	0.0002	0.156492	0.157516	0.157598		0.993(7)
	0.0005	0.156052	0.157519	0.158491		0.991(7)
	0.0010	0.157746	0.159510	0.163504		0.990(7)
	0.0020	0.163608	0.163519	0.200528		1.001(7)
	0.0030	0.171105	0.170528	0.262487		1.002(6)
	0.0040	0.179136	0.178841	0.321511		1.002(6)
	0.0050	0.187120	0.186788	0.347491		1.002(6)
	0.0070	0.202278	0.201676	0.378513		1.002(6)
0.92	0.00001	0.109488	0.108501	0.107803		1.009(11)
	0.0001	0.108842	0.109497	0.109389		0.994(9)
	0.0002	0.108969	0.109601	0.118421		0.997(9)
	0.0005	0.111127	0.111479	0.146087		0.997(9)
	0.0010	0.116826	0.116609	0.171771	0.246103	1.002(9)
	0.0020	0.130638	0.130492	0.200205	0.294370	1.001(8)
	0.0030	0.143675	0.143448	0.247137	0.399517	1.002(8)
	0.0040	0.155357	0.154887	0.295922	0.455334	1.003(7)
	0.0050	0.165871	0.165524	0.324754	0.486281	1.002(7)
	0.0070	0.184289	0.184271	0.365051	0.505167	1.000(6)
0.93	0.0001	0.054245	0.053413	0.055480	0.117051	0.999(21)
	0.0002	0.058140	0.057411	0.066529	0.168523	1.013(18)
	0.0005	0.070301	0.069132	0.095466	0.247917	1.013(15)
	0.0010	0.086069	0.084798	0.130517	0.267107	1.015(15)
	0.0020	0.108465	0.107479	0.178973	0.305583	1.009(14)
	0.0030	0.125186	0.123486	0.201544	0.335571	1.011(14)
	0.0040	0.138946	0.137553	0.239250	0.360769	1.010(13)
	0.0050	0.150824	0.149598	0.264490	0.367452	1.008(13)
	0.0070	0.170961	0.169103	0.319464		1.011(13)

Tabelle A.7: Transversale und longitudinale Spektraldaten für $J < J_c$. m_{L^*} bezeichnet dabei den ersten angeregten Zustand des longitudinalen Spektrums.

J	H	$\sqrt{\frac{H}{M}}$	m_T	m_L	m_{L^*}	$m_{L^{**}}$	$\sqrt{c_s}$
0.9359	0.00001	0.016041	0.015418	0.016508	0.103627	0.475913	1.040(52)
	0.0001	0.030815	0.029591	0.059439	0.217918		1.041(43)
	0.0002	0.040314	0.039512	0.078505	0.221591		1.020(29)
	0.0003	0.047291	0.045895	0.091619	0.239122		1.022(26)
	0.0005	0.057880	0.056514	0.112404	0.271249		1.024(22)
	0.0007	0.066138	0.064623	0.128983	0.285050		1.023(19)
	0.0010	0.076181	0.073679	0.145902	0.293859		1.021(15)
	0.0015	0.089467	0.087585	0.174526	0.309449		1.022(13)
	0.0020	0.100274	0.097688	0.194503	0.341087		1.027(13)
	0.0030	0.117761	0.114523	0.228483	0.385731		1.021(12)
	0.0040	0.131997	0.129390	0.258515	0.424839		1.020(12)
	0.0050	0.144214	0.141501	0.282836	0.589093		1.019(11)
	0.0070	0.164810	0.162405	0.324727			1.015(11)

Tabelle A.8: Transversale und longitudinale Spektraldaten für $J = J_c$. m_{L^*} bezeichnet dabei den ersten und $m_{L^{**}}$ den zweiten angeregten Zustand des longitudinalen Spektrums.

J	H	$\sqrt{\frac{H}{M}}$	m_T	m_L	m_{L^*}	$m_{L^{**}}$	$\sqrt{c_s}$
0.94	0.0001	0.026109	0.025164	0.037461	0.094486	0.255071	1.021(32)
	0.0002	0.035526	0.034320	0.051503	0.103602	0.256782	1.026(31)
	0.0003	0.042510	0.040909	0.058650	0.107298	0.257501	1.029(27)
	0.0004	0.048236	0.046451	0.020320	0.109481	0.258931	1.028(23)
	0.0005	0.053169	0.050903		0.118103	0.260271	1.024(21)
	0.0010	0.071646	0.069132		0.148519	0.261932	1.030(18)
	0.0020	0.096000	0.093836		0.182700	0.281439	1.022(13)
	0.0030	0.113663	0.110902		0.217996	0.325357	1.025(11)
	0.0040	0.128032	0.125100		0.250723	0.401833	1.024(10)
	0.0050	0.140350	0.137812		0.271971	0.499514	1.022(8)
0.0070	0.161114	0.158720		0.318193	0.576887	1.020(8)	
0.95	0.00001	0.008471	0.007501	0.008410	0.129389	0.307831	1.113(99)
	0.0001	0.021879	0.020561	0.031478	0.129449	0.318224	1.064(53)
	0.0002	0.030376	0.029194	0.046510	0.130509	0.320755	1.029(34)
	0.0005	0.046836	0.045094	0.063021	0.138611	0.323159	1.027(24)
	0.0010	0.064627	0.062123		0.149283	0.327392	1.033(17)
	0.0020	0.088560	0.085697		0.194713	0.331473	1.033(13)
	0.0030	0.106119	0.102916		0.215159	0.340342	1.033(11)
	0.0040	0.120471	0.117622		0.248472	0.407349	1.031(10)
	0.0050	0.132813	0.128542		0.268181	0.470593	1.033(10)
	0.0070	0.153659	0.149441		0.302880	0.512888	1.028(9)
0.97	0.0001	0.018823	0.017664	0.025501	0.128393	0.324421	1.066(52)
	0.0002	0.026336	0.025273	0.035619	0.129037	0.336191	1.042(41)
	0.0005	0.041130	0.040503	0.045672	0.130755	0.347855	1.046(27)
	0.0010	0.057478	0.055105		0.151209	0.359137	1.036(20)
	0.0020	0.079987	0.076603		0.188317	0.372941	1.044(15)
	0.0030	0.096791	0.092598		0.222343	0.398247	1.045(13)
	0.0040	0.110673	0.105980		0.245212	0.416072	1.044(11)
	0.0050	0.122696	0.118244		0.261375	0.419628	1.039(10)
	0.0070	0.143145	0.138613		0.277669	0.423563	1.039(9)
1.00	0.0001	0.016866	0.015541	0.022193	0.121496	0.366207	1.085(72)
	0.0002	0.023671	0.022437	0.035379	0.121727	0.367100	1.055(44)
	0.0005	0.037141	0.035102	0.049708	0.125388	0.368538	1.058(32)
	0.0010	0.052174	0.049133		0.133923	0.377247	1.058(22)
	0.0020	0.073118	0.068993		0.168405	0.388952	1.060(17)
	0.0030	0.088934	0.083979		0.181749	0.399639	1.052(14)
	0.0040	0.102099	0.096478		0.193933	0.407281	1.053(12)
	0.0050	0.113572	0.107394		0.214762	0.413272	1.058(11)
	0.0070	0.133218	0.126642		0.253340	0.418261	1.052(11)
1.20	0.0001	0.013417	0.011602	0.011817	0.108633	0.302610	1.156(99)
	0.0002	0.018895	0.016508	0.020581	0.109194	0.305917	1.145(70)
	0.0005	0.029782	0.025937	0.028049	0.111301	0.310968	1.150(44)
	0.0010	0.042036	0.036524	0.040515	0.114109	0.313092	1.151(34)
	0.0020	0.059310	0.051509		0.121244	0.316135	1.151(24)
	0.0030	0.072515	0.063513		0.129452	0.319954	1.146(19)
	0.0040	0.083611	0.072638		0.145833	0.334662	1.151(17)
	0.0050	0.093359	0.081245		0.162417	0.387473	1.149(15)
	0.0070	0.110216	0.096520		0.193288	0.510145	1.149(13)

Tabelle A.9: Transversale und longitudinale Spektraldaten für $J > J_c$.

A.4 Fit-Resultate für die transversale Masse

H	$J = 0.90$	$J = 0.91$	$J = 0.92$	$J = 0.93$	$J = 0.9359$
0.00001			0.112008		0.015753
0.0001	0.204323	0.158763	0.109103	0.053233	0.029438
0.0002	0.202534	0.157435	0.109415	0.057112	0.038852
0.0003					0.045630
0.0005	0.201189	0.157998	0.111252	0.069036	0.056030
0.0007					0.064227
0.0010	0.202618	0.159606	0.116813	0.084580	0.074141
0.0015					0.087322
0.0020	0.204927	0.164648	0.130664	0.107066	0.097989
0.0030	0.208784	0.172944	0.143550	0.123624	0.115494
0.0040	0.213631	0.180901	0.155364	0.137486	0.129835
0.0050	0.218549	0.189143	0.165872	0.149341	0.142066
0.0070	0.229897	0.204358	0.184463	0.169608	0.162765

Tabelle A.10: Fit-Ergebnisse aus Gleichung (4.10) für die transversale Masse m_T^{fit} für $J \leq J_c$.

H	$J = 0.94$	$J = 0.95$	$J = 0.97$	$J = 1.00$	$J = 1.20$
0.00001		0.007507			
0.0001	0.024672	0.020553	0.017582	0.015613	0.011598
0.0002	0.033881	0.028713	0.024770	0.022042	0.016369
0.0003	0.040760				
0.0004	0.046399				
0.0005	0.051255	0.044710	0.039027	0.034646	0.025820
0.0010	0.069411	0.062109	0.054666	0.048889	0.036522
0.0020	0.093635	0.085530	0.076365	0.068675	0.051665
0.0030	0.111124	0.102892	0.092675	0.083935	0.063222
0.0040	0.125399	0.117100	0.106182	0.096382	0.072760
0.0050	0.137818	0.129226	0.117865	0.107389	0.081797
0.0070	0.158627	0.149996	0.138068	0.126412	0.096171

Tabelle A.11: Fit-Ergebnisse aus Gleichung (4.10) für die transversale Masse m_T^{fit} für $J > J_c$.

Literaturverzeichnis

- [1] K. G. Wilson, **Confinement of Quarks**, Phys. Rev. D10 (1974) 2445
- [2] R. D. Pisarski, F. Wilczek **Remarks on the chiral phase transition in chromodynamics**, Phys. Rev. D29 (1984) 338-341
- [3] K. Rajagopal, F. Wilczek, **Static and dynamic critical phenomena at a second order QCD phase transition**, Nucl. Phys. B399 (1993) 395
- [4] J. Engels, T. Mendes, **Goldstone-mode effects and scaling function for the three-dimensional $O(4)$ model**, Nucl. Phys. B572 (2000) 289
- [5] J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes, T. Schulze, **Finite-size-scaling functions for 3d $O(4)$ and $O(2)$ spin models and QCD**, Phys. Lett. B514 (2001) 299
- [6] J. Engels, L. Fromme, M. Seniuch, **Correlation lengths and scaling functions in the three-dimensional $O(4)$ model**, Nucl. Phys. B675 (2003) 533-554
- [7] V. Pankoke, **Spektralfunktionen im linearen Sigma-Modell**, Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 2002
- [8] J. Kaupuzs, **Longitudinal and transverse Greens functions in φ^4 model below and near the critical point**, cond-mat/0202416v4
- [9] J. Kaupuzs, R. V. N. Melnik, J. Rimshans, **Monte Carlo test of Goldstone mode singularity in 3D XY model**, Eur. Phys. J. B55 (2007) 363-370
- [10] A. Z. Patashinskii, V. L. Pokrovskii, **Longitudinal susceptibility and correlations in degenerate systems**, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 64 (1973) 1445
- [11] A. Z. Patashinskii, V. L. Pokrovskii, **Fluctuation Theory of Phase Transitions**, Pergamon, Oxford, 1979
- [12] M. E. Fisher, V. Privman, **First-order transitions breaking $O(n)$ symmetry: Finite-size scaling**, Phys. Rev. B32 (1985) 447

-
- [13] L. Fromme, **Goldstone-Effekte und Korrelationslängen des dreidimensionalen $O(4)$ -Spinmodells**, Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 2002
- [14] J. M. Yeomans, **Statistical Mechanics of Phase Transitions**, Oxford University Press, 1992
- [15] J. Zinn-Justin, **Quantum Field Theory and Critical Phenomena**, Clarendon Press, Oxford, 1996
- [16] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, **The Theory of Critical Phenomena - An Introduction to the Renormalization Group**, Oxford University Press, 1992
- [17] J. Cardy, **Scaling and Renormalization in Statistical Physics**, Cambridge Lecture Notes in Physics, 1996
- [18] M. Seniuch, **Zustandsgleichungen und Korrelationslänge beim dreidimensionalen Isingmodell mit verbesserter Wirkung**, Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 2002
- [19] D. J. Wallace, R. K. P. Zia, **Singularities induced by Goldstone modes**, Phys. Rev. B12 (1975) 5340
- [20] G. Parisi, **Statistical Field Theory**, Addison-Wesley, 1988
- [21] N. D. Mermin, H. Wagner, **Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in one- or two-dimensional Isotropic Heisenberg-Models**, Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 1133
- [22] G. 't Hooft, Phys. Rep. 142 (1986) 357
- [23] F. Karsch, **Scaling of pseudocritical couplings in two-flavor QCD**, Phys. Rev. D49 (1993) 3791
- [24] F. Karsch, E. Laermann, **Susceptibilities, the Specific Heat and a Comulant in Two Flavor QCD**, Phys. Rev. D50 (1994) 6954-6962, hep-lat/9406008
- [25] M. Hasenbusch, **Eliminating leading corrections to scaling in the 3-dimensional $O(N)$ -symmetric ϕ^4 model: $N = 3$ and 4** J. Phys. A34 (2001) 8221, cond-mat/0010463
- [26] J. Engels, V. K. Mitrjushkin, T. Neuhaus, **Polyakov loop and spin correlators on finite lattices - A study beyond the mass gap**, Nucl. Phys. B440 (1995) 555-569
- [27] J. Negele, H. Orland, **Quantum Many-Particle Systems**, Addison-Wesley, New York, 1988

-
- [28] H. J. Rothe, **Lattice Gauge Theories - An Introduction**, World Scientific Notes in Physics - Vol. 59, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1997
- [29] M. Jarrel, J. E. Gubernatis, **Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data**, Phys. Rep. 269 (1996) 133-195
- [30] N. Wu, **The Maximum Entropy Method**, Springer-Verlag, Berlin, 1997
- [31] S. F. Gull, **Developments in Maximum Entropy Data Analysis** in *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, Kluwer Academic Publishers, London, 1989, 53-71
- [32] M. Asakawa, T. Hatsuda, Y. Nakahara, **Maximum entropy analysis of the spectral functions in lattice QCD**, Prog. Part. Nucl. Phys. 46 (2001) 459-508, hep-lat/0011040
- [33] M. Oevers, C. Davies, J. Shigemitsu, **Towards the application of the maximum entropy method to finite temperature Upsilon spectroscopy**, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 94 (2001) 423-426, hep-lat/0009031
- [34] **CP-PACS** Collaboration, T. Yamazaki et al., **Spectral function and excited states in lattice QCD with maximum entropy method**, Phys. Rev. D65 (2002) 014501, hep-lat/0105030
- [35] Y. Nakahara, M. Asakawa, T. Hatsuda, **Hadronic Spectral Functions in Lattice QCD**, Phys. Rev. D60 (1999) 091503, hep-lat/9905034
- [36] J. Skilling, **Classic Maximum Entropy** in *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, Kluwer Academic Publishers, London, 1989, 45-52
- [37] T. Umeda, H. Matsufuru, **Remarks on the maximum entropy method applied to finite temperature lattice QCD**, PoS LAT2005, 2006, 154, hep-lat/0510026
- [38] R. K. Bryan, **Maximum entropy analysis of oversampled data problems**, Eur. Biophys. J18 (1990) 165-174
- [39] H. Jeffreys, **Theory of Probability**, Oxford University Press, 1998
- [40] I. Wetzorke, F. Karsch, E. Laermann, P. Petreczky, S. Stickan, **Meson Spectral Functions at finite Temperature**, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 106 (2002) 510-512, hep-lat/0110132
- [41] M. Creutz, **Overrelaxation and Monte Carlo simulation**, Phys. Rev. D36 (1987) 515

-
- [42] U. Wolff, **Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems**, Phys. Rev. 62 (1989) 361
- [43] I. Wetzorke, **Lattice QCD Calculations of Hadron Spectra and Spectral Functions in the Vacuum and in a Thermal Heat Bath**, PhD thesis, University of Bielefeld, 2001
- [44] R. B. Griffiths, **Thermodynamic Functions for Fluids and Ferromagnets near the Critical Point**, Phys. Rev. 158 (1967) 176
- [45] E. Brezin, D. J. Wallace, K. G. Wilson, **Feynman-Graph Expansion for the Equation of State near the Critical Point**, Phys. Rev. B7 (1973) 232
- [46] N. Ishizuka, T. Yamazaki, **Study of unstable particle through the spectral function in $O(4)$ ϕ^4 theory**, hep-lat/0209058
- [47] T. Muta, **Foundations of Quantum Chromodynamics, An Introduction to Perturbative Methods in Gauge Theories**, World Scientific (1987)
- [48] I. Montvay, G. Munster, **Quantum Fields on a Lattice**, Cambridge Monographs on Mathematical Physics (1997)
- [49] D. Griffiths, **Introduction to Elementary Particles**, Wiley&Sons, 1987
- [50] R. E. Marshak, **Conceptual Foundations of Modern Particle Physics**, Singapur, World Scientific (1993) 673 p.
- [51] G. Veneziano, **$U(1)$ without Instantons**, Nucl. Phys. B159 (1979) 213-224
- [52] A. Peikert, **QCD thermodynamics with 2 + 1 quark flavours in lattice simulations**, PhD thesis, University of Bielefeld, 2000
- [53] F. Karsch, E. Laermann, A. Peikert, **Quark mass and flavor dependence of the QCD phase transition**, Nucl. Phys. B605 (2001) 579-599, hep-lat/0012023
- [54] S. Stickan, **Thermal Meson Properties from Correlation Functions and their Spectral Representations**, PhD thesis, University of Bielefeld, 2003
- [55] S. Wissel, **Mesonic Correlation Functions from Light Quarks and their Spectral Representation in Hot Quenched Lattice QCD** Dissertation, Universität Bielefeld, 2006
- [56] S. Holtmann, **Kritisches Verhalten und Skalenfunktion des dreidimensionalen $O(2)$ -Spinmodells**, Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 2000
- [57] G. Boyd, F. Karsch, E. Laermann, M. Oevers, **Two flavour QCD phase transition**, hep-lat/9607046

-
- [58] M. E. Peskin, D. V. Schroeder, **An Introduction to Quantum Field Theory**, Addison-Wesley Publishing Company, 1995
- [59] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, **Finite size effects on measures of critical exponents in d=3 O(N) models**, Phys. Lett. B387 (1996) 125
- [60] P. Hasenfratz, H. Leutwyler, **Goldstone Boson related finite size effects in Field Theory and Critical Phenomena with O(N) Symmetry**, Nucl. Phys. B343 (1990) 241
- [61] A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen, **New Monte Carlo Technique for Studying Phase Transitions**, Phys. Rev. 61 (1988) 2635
- [62] V.N. Gribov, **Quantization of non-Abelian gauge theories**, Nucl. Phys. B139 (1978) 1
- [63] T. Schulze, **Untersuchung von Goldstone-Effekten, Widom-Griffiths- und Finite-Size-Skalenfunktionen beim dreidimensionalen O(2)-Spinmodell**, Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 2000
- [64] K. Huang, **Statistical Mechanics (2. Edition)**, John Wiley & Sons Inc., 1987
- [65] K. Kanaya, S. Kaya, **Critical exponents of a three dimensional O(4) spin model**, Phys. Rev. D51 (1995) 2404
- [66] O. Kaczmarek, **Korrelationsfunktionen und Potentiale mit verbesserten Wirkungen**, Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 1997

Danksagung

Zum Abschluss möchte ich mich bei all denen bedanken, die mir bei der Anfertigung dieser Dissertation geholfen haben. Dies gilt zuvorderst und insbesondere für meinen Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Jürgen Engels, für die fachlich hervorragende und ausgezeichnete Betreuung und seine Bereitschaft, sicher jederzeit umfassend und geduldig mit allen meinen Fragen auseinander zu setzen und Probleme zu diskutieren. Ich danke Herrn Prof. Dr. Engels für die Möglichkeit, dass ich diese Arbeit unter seiner Anleitung anfertigen durfte.

Darüber hinaus möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Edwin Laermann für seine anregenden Hinweise und seine Bereitschaft bedanken, die Bürde des Gutachters für meine Dissertation auf sich genommen zu haben. Ein ganz besonderer Dank geht an Dr. Olaf Kaczmarek für seine stetige Unterstützung in den vergangenen viereinhalb Jahren und die immerwährende Bereitschaft, für meine zahlreichen Problemstellungen ein offenes Ohr zu haben.

Nicht minder danken möchte ich meinem ehemaligen langjährigen Kommilitonen Dr. Kay Alexander Hübner für die unermüdliche Unterstützung und stets gute Zusammenarbeit. Besonders die zahlreichen fruchtbaren Diskussionen über wissenschaftliche und andere Themenbereiche in und außerhalb unseres Büros haben unserer gemeinsame Studienzeit nachhaltig geprägt.

Bedanken möchte ich mich darüber hinaus bei allen anderen Mitgliedern und Ehemaligen der Arbeitsgruppe (D6/E6) für die vielen Gespräche über (nicht-)physikalische Dinge, die wesentlich zur angenehmen Atmosphäre während dieser Jahre beigetragen haben. Ebenso gilt ein besonderer Dank den Sekretärinnen Gudrun Eickmeyer und Susi von Reder für ihre große Hilfe und administrative Unterstützung.

Abschließend danke ich meiner Familie, die mich während meines gesamten Studiums unterstützt hat.

Erklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit mit keinen weiteren als den im Literaturverzeichnis angegebenen Hilfsmitteln angefertigt zu haben.

Oliver Vogt