

3 Modelle und Darstellungen

3.1 Ising-Modell

Das Isingmodell ist eines der einfachsten Modelle. Es erlaubt, die Physik komplizierter realer Systeme zu verstehen (Universalität!). Das Modell beruht auf diskreten Variablen, welche die Spins auf einem Gitter repräsentieren und zwei Werte einnehmen können ($s_i \pm 1$). Als Gitter können folgende dienen:

- 1D: Kette
- 2D: Quadratgitter, Dreiecksgitter, etc...

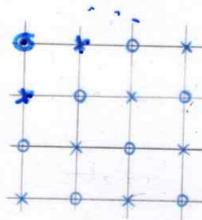
$$H(\{s_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H}$$

- $J > 0$: Ferromagnetische Kopplung \Rightarrow Tendenz zu FM ausgerichteten Spins (aber Einfluss durch Temperatur)
- $J < 0$: Antiferromagnetische Kopplung \Rightarrow Tendenz zu antiparallelen Spins.

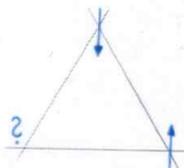
Für $J < 0$ wichtige Unterscheidung
(Genauer: gekoppelte Plätze)

- **Bipartites Gitter:** Nächste Nachbarn gehören zu 2 verschiedenen Untergittern \Rightarrow AF Spinkonfiguration möglich (Neel-Konfiguration)



Klass. Ising AF auf bipart. Gitter äquiv. zu FM

- **Nicht-Bipartites Gitter:** Zum Beispiel Dreiecksgitter



"frustriert"

$H = \sum_i (-J_{ij}) S_i \cdot S_j$

Wichtig: „Bipartit“ ist eine Eigenschaft der Kopplungsmatrix J_{ij} , nicht der geometrischen Position der Atome. Ein quadratisches Gitter mit übernächster-Nachbar-Kopplung ist nicht bipartit!

Relevante Observablen sind die Magnetisierung,

$$M = \frac{1}{N} \langle M \rangle$$

$$M = \sum_i s_i$$

Bei $h \rightarrow 0$: $M \approx \text{lim}_{h \rightarrow 0} \text{lim}_{N \rightarrow \infty} M$
 $h \rightarrow 0$ $N \rightarrow \infty$

s.S. 12

Suszeptibilität,

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \ln Z$$

sowie die Korrelationsfunktion

$$G_{ij}^c = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

$$\chi = \frac{\beta}{N} \sum_{ij} G_{ij}^c$$

3.2 Realisierungen des Ising Modells

3.2.1 Magnetische Systeme

Schrittweise Vereinfachung von realen Materialien:

Reale Materialien \rightarrow Hubbard-Modell \rightarrow (bei Halbfillung) Heisenberg-Modell

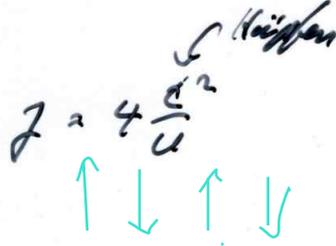
qm! Spin $\frac{1}{2}$ Heisenbergmodell:

$$\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle} \frac{J_{xy}}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+) + J_z \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z$$

$2 (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)$

\rightarrow Ising

qm!



Das Verhalten bei großen Abständen kann durch einfachere Modelle beschrieben werden (Universalität). Weitere Approximationen sind stark abhängig von J_{xy} und J_z :

- $J_z > J_{xy}$: Ising-Modell (= Heisenberg bei $J_{xy} = 0$)
- $J_z < J_{xy}$: XY-Modell (= Heisenberg bei $J_z = 0$)
- $J_z = J_{xy}$: Bliebt isotropes Heisenberg-Modell

"easy axis"
"easy plane"

klassisch
qm oder klassisch (klass Vektoren = Grenzfall für Spin-Länge unendlich)
qm oder klassisch
s.a. Kap. 3.4

Es ist dabei nicht notwendig, dass ein Term deutlich größer ist als der andere. Sobald eine Kopplung (auch nur minimal) schwächer ist als die andere, kann sie für große Abstände vollständig vernachlässigt werden.

\Rightarrow wenn J_z etwas größer als J_{xy} ist, dann reicht für große Abstände das Ising Modell aus!

$$\hat{H} \approx J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$$

"Transversales Ising-Modell": $\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i^x s_j^x - h \sum_i s_i^z$

3.2.2 Binäre Systeme

"β-brass"

Ein Beispiel hierfür ist β-Messing (β-brass). β-Messing hat ein BCC-Gitter mit Cu und Zn Atomen auf den Gitterplätzen. Es zeigt einen Phasenübergang von Ordnung zu Unordnung bei $T_c = 733K$. Zur Beschreibung des Systems kann pro Platz folgende Ising Variable verwendet werden:

$$s_i = \begin{cases} +1 & \text{Zn} \\ -1 & \text{Cu} \end{cases}$$

Im Gegensatz zu kontinuierlichen Spins handelt es sich hierbei um keine Näherung, da auch das reale System ein Zwei-Zustands-System pro Platz ist.

Einfaches Modell für die Energie: Berücksichtige nur unterschiedliche Energien für verschiedene Nachbar-Paare von Atomen (a: Cu-Cu, b: Zn-Zn, c: Cu-Zn).

b a

$$E_{ij} = a(1 + s_i)(1 + s_j) + b(1 - s_i)(1 - s_j) + c(1 + s_i)(1 - s_j) + c(1 - s_i)(1 + s_j)$$

$$= Js_i s_j - h \left(\frac{s_i + s_j}{2} \right) + const. \quad \approx \text{n.n. Ising!}$$

$$J = a + b - 2c$$

$$h = 2b - 2a$$

Dieses einfache Modell beschreibt das kritische Verhalten von Messing gut. Verbesserung ist möglich wenn thermische Ausdehnung des Messings berücksichtigt wird (\Rightarrow Kopplungskonstanten sind Temperaturabhängig, $J(\beta)$, $h(\beta)$). Es ergeben sich mit guter Genauigkeit die gleichen kritischen Exponenten wie im Experiment.

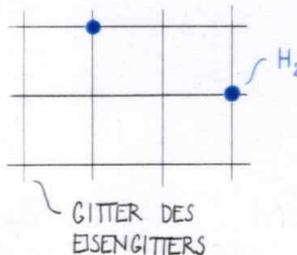
N.B. 3.2.3 Gitter-Gas-Modell

Sehr grobes Modell eines Gases, mit diskretem Gitter:

$$n_i = \begin{cases} 1 & \text{Platz ist besetzt} \\ 0 & \text{Platz ist leer} \end{cases}$$

Es gibt in diesem Modell keine kinetische Energie und keine Impulse.

Anderer physikalischer Fall: Adsorbiert Wasserstoff auf einer Oberfläche (z.B: Eisen), so bildet sich ein Gitter der Größe der Substratatome. Jeder Platz ist entweder mit H besetzt oder frei.



Der Hamilton kann geschrieben werden als

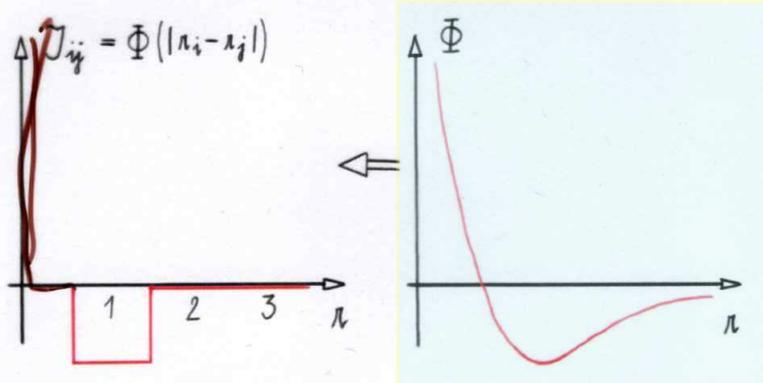
$$H = \sum_{ij} J_{ij} n_i n_j - \mu \sum_i n_i$$

wobei μ das chemische Potential ist.

$$J_{ij} = \Phi(|i - j|)$$

wobei Φ z.B. das Lennard-Jones-Potential sein kann. Als Näherung reicht attraktive Wechselwirkung nur mit nächsten Nachbarn (wegen Universalität ist die genaue Form der Wechselwirkung unwichtig).

bei sehr großen Abständen, nahe an μ



$$n_i = \frac{1 + M}{2}$$

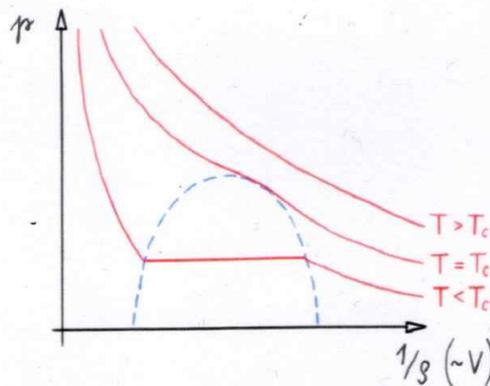
Die Dichte wird definiert als:

$$\rho = \frac{1}{N} \langle \sum_i n_i \rangle = \frac{1 + M}{2} \quad (3.1)$$

mit N der Anzahl der Gitterplätze und M der Magnetisierung in Spin-Sprache. Der Druck wird definiert als:

$$p = \frac{1}{N\beta} \ln Z \quad \text{wie } \exp(-\beta p V), V=N$$

Das ^{diagramm} Zustandsgleichung $p(V)$ ähnelt stark einem realen Flüssigkeits-Gas System.



3.3 Potts-Modell

Verallgemeinerung des Ising-Modells: $\sigma_i = 1, 2, 3, \dots, q$ mit q der Anzahl an möglichen Zuständen pro Platz.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - h \sum_i \delta_{\sigma_i, 1}$$

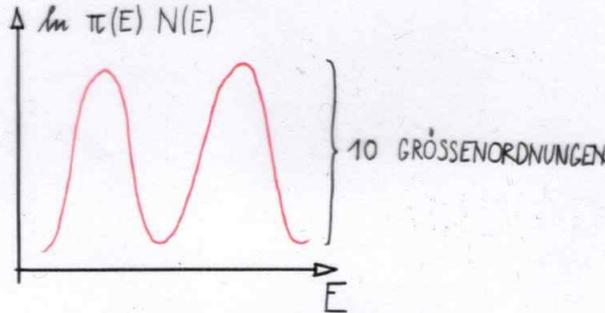
Potts-Modell ist bei $q = 2$ äquivalent zum Ising Modell ($s_i s_j = 2\delta_{s_i, s_j} - 1$). Daraus folgt $\beta_{\text{Potts}} = 2\beta_{\text{Ising}}$.

Realisierung z.B. bei Adsorption von Krypton auf Graphit (hat 3 Untergitter, nur eines der 3 lokalen Untergitter ist jeweils besetzt).

- Die Lösung ist in $d=2$ (Quadratgitter) exakt bekannt. Für $q \leq 4$ kontinuierlicher Phasenübergang und für $q > 4$ Phasenübergang 1. Ordnung. Je größer q desto ausgeprägter ist der Phasenübergang. Für $q \approx 10$ variiert die Wahrscheinlichkeit für eine gegebene Energie um ca. 10 Größenordnungen \Rightarrow Monte-Carlo Simulationen sind schwierig auf Grund ausgeprägter „Täler“ in der Energielandschaft.

$\eta(k) \approx \frac{1}{2} e^{-\beta E}$

$N(E) \approx H$ Zustände bei E



\rightarrow "Multikannales Ensemble" !

- Andere Realisierung: Vereinfachung der QCD (Quanten-Chromo-Dynamik). Interne Symmetrie $SU(3)$ („Farb“-Freiheitsgrade). „Zentrum“ $Z(3)$ (Gruppe mit 3 Elementen, analog zu ± 1 für $SU(2)$ der Spins.)

3.4 Klassisches Heisenberg- und XY-Modell

QM: \hat{H} = wie Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen

- Bei Materialien mit Hundscher Regel (Materialien mit hohen Orbitalen \Rightarrow viele Elektronen im Orbital)
- Hundsche Regel bevorzugt Spin in gleiche Richtung
- Oft Spin $n \cdot \frac{1}{2}$
- Hamilton Operator \hat{H} $\hat{=}$ Quantenmechanischem Operator wie oben (als eff. Modell)
($S^\pm : |j, m\rangle \rightarrow |j, m \pm 1\rangle$)
- Physik eines solchen Modells wird immer ähnlicher klassischer Physik
- Bei $S \rightarrow \infty$ erhält man Verhalten eines klassischen Spins \vec{S} . $|\vec{S}| = 1$ (Umnormierung notwendig : $\sqrt{S(S+1)}J \rightarrow J_{\text{klassisch}}$)



Wie groß ist unendlich?

- $S = \frac{5}{2}$ ist schon nahe am klassischen Ergebnis \rightarrow Manganate !
- $S = \frac{3}{2}$ funktioniert „zur Not“

3.4.1 Spezialfall $J_z = 0$: klassisches XY-Modell

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y$$

Klass. Varianten: a) 3- komponentiger Spin b) 2- komponentiger Spin ($\hat{=}$ Winkelvariable)

!!Sprachverwirrung!!:

"Heisenbergmodell" $\hat{=}$

- Quantenmechanisch oder klassisch mit ~~d~~ 2

"XY- Modell" $\hat{=}$

- Klassisch mit 2 Komponenten
- Klassisch mit 3 Komponenten
- Quantenmechanisch mit ~~d~~ 2 Komp.

Beispiel Flüssigkeitskristalle ($d = 2$ dim) kleine Zylinder Ausrichtung \rightarrow Winkelvariable

"Das "XY-Modell": 2 dim, 2 komponentig $\hat{=}$ Kosterlitz-Thouless (KT- Phasenübergang)

Kein Ordnungsparameter! Keine endliche "Magnetisierung"

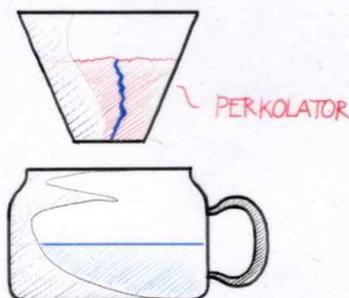
Pü • „unendliche Ordnung“ : Jede Ableitung von Z ist stetig

- PÜ ist 'topologisch' Dichte ("Kondensation") von Vortizes
- Relevant für PÜ der Hochtemperatur-Supraleiter (Schichtstruktur \rightarrow nur 2 Dimensionen \rightarrow Vortices schwer zu stören)
- siehe letztes Kapitel

QM oder Klass. Modell!

3.5 Perkolation

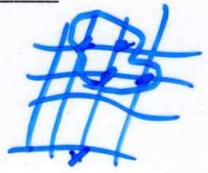
(Begriff "Perkulator": Kaffeemaschine)



3.5.1 Einfache Modelle

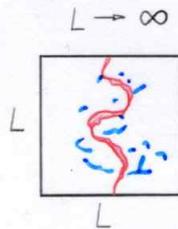
- Gitter, z.B. 2-dim, quadratisch
- Site Percolation: Variable: $n_i = 0,1$ auf Gitterplätzen n_i mit Wahrscheinlichkeit p ; keine zusätzliche Wechselwirkung d.h. Ising bei $J=0$ wie mit Magnetisierung $M = p - (1-p)$
- Definiere "Cluster" als Gruppen mit benachbarten besetzten Plätzen, ohne Diagonale
- Fragestellungen:
 - Wie groß sind die Cluster? (Größenverteilung)
 - Bei welchem p gibt es (im Mittel) zumindest einen Cluster, der durch das ganze Gitter geht

Site Percolation



Hier!

Perkolations



- Wie viele Plätze sind in diesem Cluster
- Geometrische Struktur? (Man findet Fraktale) *nähe p_c*
- Bond-Percolation: analog, Variable $n_i, n_i = 0,1$ auf Gitterkanten

3.5.2 Anwendungen, Beispiele

- Kaffeefilter: Perkolations von Wasser
- Ölsuche:
 - Perkolations von Öl durch Gestein
 - Untersuche Bohrkern Fragen:
 - * Gibt es perkolierende Cluster \rightarrow dann kann Öl in Bohrstelle fließen
 - * Wie groß ist der Anteil des perkolierenden Clusters am Volumen \rightarrow welcher Anteil des Öls kann gefördert werden
- Random Resistor Network: welche Leitfähigkeit besteht zwischen oben und unten (Hier zählt nicht die Gesamtgröße sondern die Größe des sogenannten „Backbones“ ohne Dangling Bonds)

Das alles führt zur Graphentheorie.



3.5.3 Beispiel für eine exakte Lösung

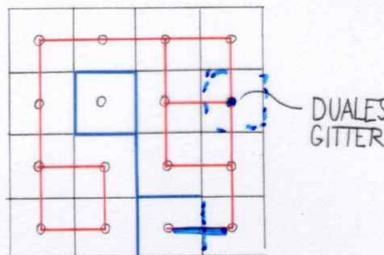
Kritische Wahrscheinlichkeit p_c für Bond-Perkolation auf dem Quadratgitter gesucht:

- Gitterkanten besetzt mit Wahrscheinlichkeit p

$p > p_c$: • Unten und oben verbunden ($L \rightarrow \infty$) "Perkolation"

Lösung

Man führt ein duales Gitter ein.



blau: original
rot: dual

- duales Gitter: Punkte in der Mitte der Quadrate des ursprünglichen Gitters : ergibt wieder ein Quadratgitter
- Gegeben Bond-Konfiguration auf ursprünglichen Gitter, lege Bonds auf dualen Gitter überall dort, wo keine Bonds des ursprünglichen Gitters gekreuzt werden. -> wieder eine Bond-Konfig. auf einem Quadratgitter
- wenn $p > p_c$, dann Perkolation auf ursprünglichem Gitter oberen Rand und unteren Rand (und rechts und links) Daraus folgt:
 - auf dualen Gitter keine Perkolation möglich
 - $q < q_c$
- Bonds auf ursprünglichem Gitter entsprechen 1 zu 1 Bonds auf dem dualen Gitter
- Konfiguration der Bonds auf dem dualen Gitter und zufällig mit Wahrscheinlichkeit $q = 1 - p$ genauso $p < p_c \Rightarrow q > q_c \Rightarrow p_c = \frac{1}{2}$ und $q_c = \frac{1}{2}$

3.5.4 Anwendungen der Perkolation

„Waldbrände“ (Site Perkolation)

Die Plätze eines quadratischen Gitters sind mit Wahrscheinlichkeit p mit „Bäumen“ besetzt. Bei einem „Brand“ startet das Feuer bei einem Punkt und breitet sich pro Zeitschritt je einen Platz horizontal und vertikal aus (siehe Abb. 3.1). In diesem Modell brennt jeder Platz nur einen Zeitschritt.

Typische Zeitskalen für die Dauer des Brandes sind:

p klein: Die Zeit t ist kurz (der Brand erlischt schnell), da nur ein kleiner Bereich rund um den Startpunkt zusammenhängt.

p groß: Hier wird t proportional zur linearen Ausdehnung L des Systems.

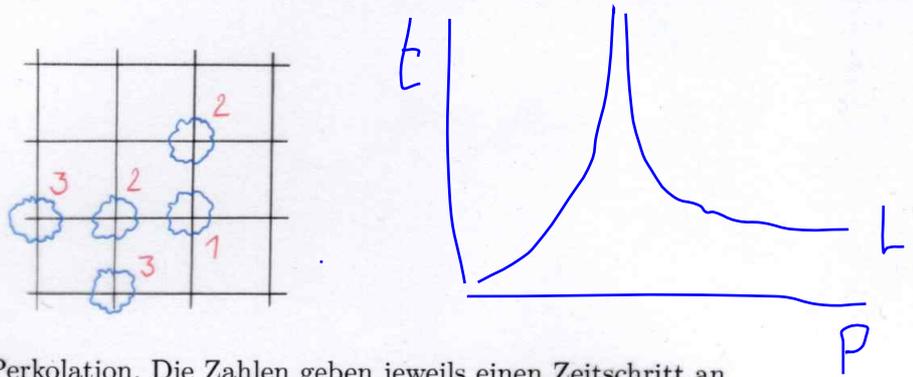


Abbildung 3.1: Verlauf der Site Perkolation. Die Zahlen geben jeweils einen Zeitschritt an

$p \approx p_c$: Bei einer kritischen Besetzungsdichte p_c braucht das Feuer lange, auf kurvigem Wege, um das System zu durchqueren.

Bei sehr großen L findet man:

Zeit $t \sim \left(\frac{p - p_c}{p_c} \right)^{-z}$ (limitiert durch Zahl L^2 der Gitterplätze) (3.2)

\leftarrow (kleines z)

\rightarrow Abb. 269,4

z z Z wird als dynamischer kritischer Exponent bezeichnet, er beschreibt das Verhalten von Zeitskalen. Der Faktor $\frac{p - p_c}{p_c}$ divergiert, was als „Critical Slowing Down“ bezeichnet wird.

Nebenbemerkung: Dieses Slowing Down tritt auch bei Markov-Ketten-Monte-Carlo auf. Die Autokorrelationszeit verhält sich:

- nahe der kritischen Temperatur ($\xi \gg 1$) wie $\tau \sim \xi^z$, was „Critical Slowing Down“ entspricht.
- bei tiefen Temperaturen wie $\tau \sim e^{const \cdot \beta \cdot Vol}$. Hier tritt „exponentielles Slowing Down“ auf.

$1/2T$

Reale Materialien: Metastabilität von magnetischen Domänen
 \rightarrow Anwendung: Speicherung von Bits (Festplatten)

3.6 Ising Modell: Fortuin-Kasteleyn-Darstellung

Diese Darstellung des Ising Modells ist sowohl für analytische Zugänge und exakte Beweise als auch für numerische Verfahren wichtig. Die Hamiltonfunktion des Isingmodells lautet:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (3.3)$$

wobei in der weiteren Betrachtung $h=0$ gesetzt wird. Damit ergibt sich die Zustandssumme wie folgt.

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{s\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j} = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J s_i s_j} \quad (3.4)$$

In der weiteren Betrachtung wird auch die Kopplungskonstante J weggelassen, da sie für die mathematischen Zusammenhänge nicht relevant ist. Der Faktor $e^{\beta s_i s_j}$ hat nur die zwei möglichen Werte $e^{\pm\beta}$. Umformulierung dieses Faktors zweimal angewendet ergibt:

Schreibe β statt βJ

(eigentlich beta J)

$$e^{-\beta} e^{\beta s_i s_j} =: (1-p) + p \delta_{s_i s_j} \quad \text{mit } p = 1 - e^{-2\beta} \quad (3.5)$$

$$e^{\beta s_i s_j} = e^{\beta} \sum_{g=0,1} \underbrace{(1-p) \delta_{g,0} + p \delta_{s_i s_j} \delta_{g,1}}_{W(s_i, s_j, g)} \quad (3.6)$$

Hier wurde eine künstliche neue Variable g eingeführt, um in weiterer Folge zu einer neuen Darstellung zu kommen. Glg. 3.6 eingesetzt in Glg. 3.4 ergibt die sogenannte ESFK Darstellung. ESFK steht hier für Edwards, Sokal, Fortuin, Kasteleyn (auch interessant „Sokal Hoax“).

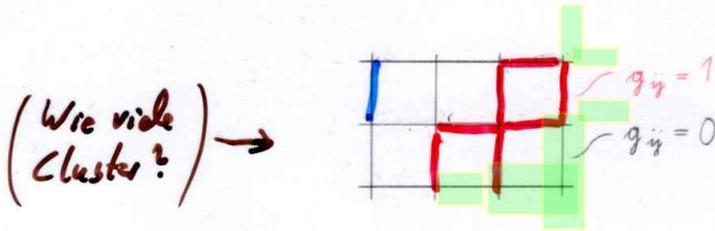
ESFK Darstellung : in Spins und Bonds

$$Z = \sum_{\{s\}} \sum_{\{g_{ij}=0,1\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta} W(s_i, s_j, g_{ij}) \quad (3.7)$$

Man betrachte eine feste Konfiguration der $\{g_{ij}\}$

$$W(s_i, s_j, g_{ij}) = (1-p) \delta_{g_{ij},0} + p \delta_{s_i s_j} \delta_{g_{ij},1}$$

Wenn also $g_{ij} = 1$ ist muss $s_i = s_j$ sein, sonst liefert der zweite Summand keinen Beitrag zu Z . Die Bereiche mit $\{g_{ij} = 1\}$ definieren also „Cluster“ in welchen die Spins jeweils den selben Wert haben müssen.



⚠ Verschiedene benachb. Cluster können gleiche Spins haben!

Leichte Umformung und Vertauschen der Summen (was bei endlicher Anzahl von Summanden erlaubt ist) ergibt die Zustandssumme

ESFK:
$$Z = \sum_{\{g_{ij}\}} \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta} (1-p) \left(\delta_{g_{ij},0} + \frac{p}{1-p} \delta_{s_i s_j} \delta_{g_{ij},1} \right) \quad (3.8)$$

Die Konfigurationen $\{g_{ij}\}$ definieren jeweils die Cluster. Die $\{s_i\}$ liefern jeweils nur Beiträge von gleichen Spins pro Cluster, es gibt also jeweils zwei Beiträge pro Cluster (alle Spins up oder down). Daraus ergibt sich die

Fortuin-Kasteleyn Darstellung : nur in Bonds

$$Z = \underbrace{(e^{\beta} (1-p))}_{\text{Vorfaktor}} \sum_{\{g_{ij}=0,1\}} \underbrace{\left(\frac{p}{1-p} \right)^{\#g_{ij}=1}}_{\text{2}^{\#Cluster}} \quad (3.9)$$

In dieser Darstellung existieren nun neue Variable g_{ij} , die auf den Gitterkanten existieren.

$e^{\beta} (1-p) = e^{-\beta}$

$\frac{p}{1-p} = \frac{1-e^{-2\beta}}{e^{-2\beta}} = e^{2\beta} - 1 \rightarrow (3.14)$

Cluster sind physikalisch relevant: Gebiete korrelierter Spins !

Wir betrachten nun die Korrelationsfunktion

n, m : Gitterpunkte

$$G(n, m) = \langle s_n s_m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_n s_m e^{-\beta H} \quad (3.10)$$

Die selben Transformationen wie zuvor führen auf

$$\sum_{\{s_i\}} s_n s_m e^{-\beta H} = \sum_{\{g_{ij}\}} \sum_{\{s_i\}} s_n s_m \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta(1-p)} \left(\delta_{g_{ij},0} + \frac{p}{1-p} \delta_{g_{ij},1} \delta_{s_i, s_j} \right) \quad (3.11)$$

Bei Betrachtung einer Konfiguration der g_{ij} , also Definition der Cluster ergeben sich 2 Fälle:

1. n und m liegen in verschiedenen Clustern.

Es gibt jeweils 4 Beiträge wie die Cluster in denen n und m liegen orientiert sein können: $s_n s_m = \uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow$ welche mit $s_n s_m = 1, -1, -1, 1$ zur Korrelationsfunktion beitragen. Da das Gewicht $W(s_i, s_j, g_{ij})$ immer gleich ist, verschwinden die Beiträge zu $G(i, j)$.

2. n und m liegen im selben Cluster

Nun müssen beide Spins gleich sein $s_n = s_m \Rightarrow s_n s_m = 1$
Diese Terme liefern den selben Beitrag wie bei der Zustandssumme

Vorfaktor hebt sich heraus

Damit kann $\langle s_n s_m \rangle$ auch über die $\sum_{\{g_{ij}\}}$ alleine ausgedrückt werden.

$$\langle \frac{s_n s_m}{\text{Wert } \pm 1} \rangle = \frac{\sum_{\{g_{ij}\}} \left(\delta(n, m \text{ selber Cluster}) \left[e^{\beta(1-p)} \right]^{\#Kanten} \left(\frac{p}{1-p} \right)^{\#g_{ij}=1} 2^{\#Cluster} \right)}{\sum_{\{g_{ij}\}} \left(1 \left[e^{\beta(1-p)} \right]^{\#Kanten} \left(\frac{p}{1-p} \right)^{\#g_{ij}=1} 2^{\#Cluster} \right)} \quad (3.12)$$

$= \frac{3 \cdot 9 \cdot 4}{2 \cdot 4}$

$$= \overbrace{\langle \delta(n, m \text{ selber Cluster}) \rangle_{W(\{g_{ij}\})}}^{\text{Werte } 0,1} \Rightarrow \text{Cluster physikalisch!} \quad (3.13)$$

Man erhält also die Korrelationsfunktion ausgedrückt in den neuen „Bond-Variablen“ g_{ij} . Diese wird auch „Improved Estimator“ genannt, da die Varianz der Observablen $\delta(\dots)$ häufig viel kleiner ist als jene von $s_i s_j$.

$\langle \{g_{ij}\} \rangle$
 $\leftrightarrow \langle \{s_i s_j\} \rangle$

3.6.1 Energie-Erwartungswert in FK-Darstellung

Energie $\langle E \rangle$ in der Bonddarstellung:

$$Z = e^{-\beta N_k} \sum_{\{g_{ij}=0,1\}} (e^{2\beta} - 1)^{n_g} 2^{N_{cluster}} \quad (3.14)$$

mit N_k Anzahl Gitterkanten, n_g Anzahl der Bonds. Beachte das $N_{cluster}$ nicht von β abhängt, jedoch $\langle N_{cluster} \rangle$ schon.

(mit $g_{ij} = 1$)

$$n_g (\dots)^{n_g-1} = n_g / (\dots) \cdot (\dots)^{n_g}$$

$$\langle E \rangle = - \frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} = N_k - \frac{2 \langle n_g \rangle}{1 - e^{-2\beta}} \quad (3.15)$$

$\leftarrow \frac{e^{2\beta}}{e^{2\beta} - 1}$

ü

Alternativ:

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \left\langle \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right\rangle = \sum_{\langle ij \rangle} \langle s_i s_j \rangle \\
 &= V n_{neig} \langle s_0 s_1 \rangle = V n_{neig} G(1) \\
 &= V n_{neig} \langle \delta(0 \text{ und } 1 \text{ im selben Cluster}) \rangle = V n_{neig} \cdot G(r=1)
 \end{aligned}
 \tag{3.16}$$

Bsp: i und j nicht direkt verbunden, aber im selben Cluster 

mit dem Systemvolumen $V = L^d$ und der Anzahl der nächsten Nachbarn $n_{neig} = 2d$.

3.7 Swendsen-Wang Algorithmus

Benutzt die ESFK-Darstellung. Idee: Monte Carlo im erweiterten Raum der $\{g_{ij}\}$ und $\{s_i\}$, mit $W(s_i, s_j, g_{ij})$

Schritt 1: Gegeben eine Spin-Konfiguration $\{s_i\}$, wähle eine (neue) Bond-Konfiguration $\{g_{ij}\}$ gemäß der durch $W(s_i, s_j, g)$ gegebenen bedingten Wahrscheinlichkeit:

$$s_i \neq s_j \Rightarrow g_{ij} = 0$$

$$s_i = s_j \Rightarrow \text{Wahrscheinlichkeit für } g_{ij} = 1 \text{ ist } \frac{p}{p+(1-p)} = p$$

"Heat bath"
"Gibbs sampler"

Schritt 2: Gegeben eine Bond-Konfiguration $\{g_{ij}\}$, wähle eine (neue) Spin-Konfiguration $\{s_i\}$ gemäß $W(s_i, s_j, g)$ mit der bedingten Wahrscheinlichkeit:

- In jedem Cluster müssen Spins gleich sein, unterschiedliche Cluster beliebig
- Wähle für jeden Cluster Spin \uparrow oder \downarrow mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ unabhängig für jeden Cluster

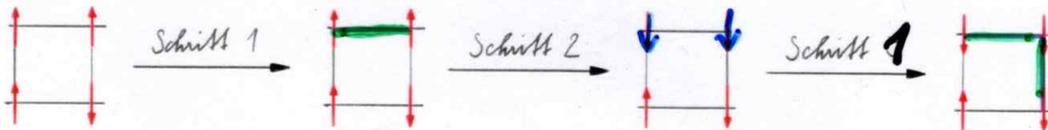


Abbildung 3.2: Beispiel für die Iterationsschritte des Swendsen-Wang Algorithmus

Nebenbemerkung: In Schritt 2 ändern korrelierte Gebiete von Spins (Cluster) gemeinsam ihre Richtung. \Rightarrow viel schneller als einfaches „Single-Spin-Flip“ Monte Carlo, dort braucht man typischerweise $\mathcal{O}(\xi^2)$ Updates.

Größe der Cluster \leftrightarrow Korrelationslänge ξ

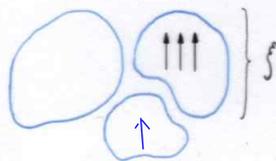


Abbildung 3.3: Zusammenhang zwischen Clustern und Korrelationslänge

Detailed Balance des Swendsen-Wang Verfahrens: (Allgemeiner siehe auch: H.G. Evertz, "The loop algorithm", chapter 2.3 "Kandel-Domany-framework")

Wir zeigen Detailed Balance für den Übergang zwischen Spin-Konfigurationen. (Für Bond-Übergänge ist der Beweis analog).

$$\text{Zu zeigen: } p(S \rightarrow S') / p(S' \rightarrow S) = W(S') / W(S)$$

Wir haben in (3.6)(3.7) "Graphen G" (Konfigurationen von Bondvariablen) eingeführt mit $W(S) = \sum_G W(S, G)$

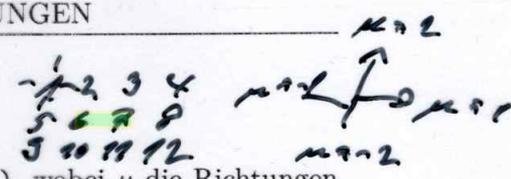
Die Verwendung der bedingten Wahrscheinlichkeiten in Schritt 2 bedeutet $p(S \rightarrow (S, G)) = W(S, G) / (\sum_G W(S, G)) = W(S, G) / W(S)$

Die Verwendung der bedingten Wahrscheinlichkeiten in Schritt 1 bedeutet $p((S, G) \rightarrow (S', G)) = W(S', G) / (W(S, G) + W(S', G))$

$$\text{Einsetzen: } p(S \rightarrow S') = \sum_G p(S \rightarrow (S, G)) p((S, G) \rightarrow (S', G)) = \sum_G \left(\frac{W(S, G)}{W(S)} \right) \frac{W(S', G)}{W(S, G) + W(S', G)}$$

$$\text{analog: } p(S' \rightarrow S) = \sum_G \left(\frac{W(S', G)}{W(S')} \right) \frac{W(S, G)}{W(S, G) + W(S', G)}$$

Die Faktoren $1/W(S)$ bzw. $1/W(S')$ kann man vor die Summe ziehen. Die restliche Summe ist dann in beiden Fällen gleich und fällt bei dividieren der beiden Zeilen heraus.



3.7.1 Swendsen-Wang: Programmierung

- Separate Routine für Gittergeometrie: $j = \text{neighbour}(i, \mu)$, wobei μ die Richtungen nummeriert, z.B. $\mu = -2, -1, (0), 1, 2$ (allgemein von -Dimension bis +Dimension)
- Initialisierung: wähle (zufällig) eine Spin-Konfiguration
- Sweep:

$\{s_i\}$
 $\{g_{ij}\}$

Schritt 1: Gegeben Spins $\{s_i\}$, wähle Bonds $\{g_{ij}\}$ wie oben.

- Brauche Feld $\{g_{ij}\}$, initialisiere auf "-1" (unzulässiger Wert) jeweils zu Beginn von Schritt 1
- Für alle i : alle μ : wähle $g_{i, i+\mu}$ wenn noch nicht gesetzt

Schritt 2: Gegeben $\{g_{ij}\}$:

- Bestimme Cluster, z.B. mit "Breadth First Search" (Vorteil: vektorisierbar, Alternativen: "Hoshen-Kopelman", "Depth First Search" u.v.a.m.)
- Cluster fertig \Rightarrow Flip mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$

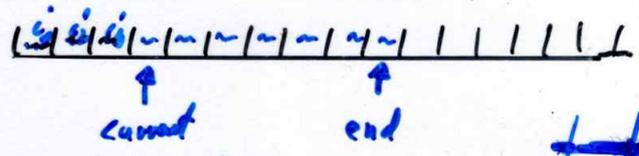
Breadth First Search

Siehe auch Paper "Vectorized Search" auf der Webseite der Vorlesung

Brauche 2 Listen:

$\text{InCluster}(i)$
 $\text{List}(i)$

1. Für jeden Gitterplatz: Information, ob Gitterplatz schon einem Cluster zugeordnet ist
2. Liste der Plätze in Cluster mit Pointern auf den aktuell bearbeiteten Gitterplatz (current) und auf das Ende der Liste (end) end=0



Schleife über alle Gitterplätze i:

- Wenn i schon in Cluster \Rightarrow nächstes i
- sonst:

- Beginne (neue) Liste mit dem einzigen Eintrag i . Setze Pointer "current" und "end" auf Listenposition von i .
- Gehe zu allen Nachbarn j von i , wenn $g_{ij} = 1$ füge j zur Liste hinzu und markiere j als in einem Cluster
- While current < end: setze current=current+1 und wiederhole vorigen Schritt, jetzt mit den Nachbarn des bei "current" eingetragenen Platzes.

d.h. $\text{Liste}(\text{end}+1) = i$; $\text{end} \rightarrow \text{end}+1$



• Cluster-Flips z.B. während der Suche!

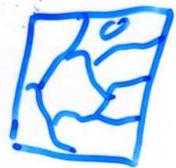
↪ end = end + 1
wenn noch nicht in liste

3.8 „Single-Cluster“-Variante von Swendsen Wang

Erfinder: U. Wolff bzw. M. Hasenbusch (zur selben Zeit)!

Motivation:

[Betrachte eine Konfiguration von Swendsen-Wang Cluster ~~(zur Motivation)~~]



- Monte-Carlo-Update (Modifizierter „Schritt 2“ von Swendsen Wang)
 - Wähle einen zufälligen Gitterplatz, ~~konstruiere Cluster um diesen Platz~~
 - Flip des zugehörigen Clusters mit 100% Wahrscheinlichkeit

Detailed Balance: $p(\{s\} \rightarrow \{s'\}) = p(\text{Platz in entsp. Cluster zu wählen}) \underbrace{p(\text{Spins drehen})}_{=100\%} = p(\{s'\} \rightarrow \{s\})$

Effizientere Version von Schritt 1

Erfüllt Detailed Balance!
 $\frac{p(\{s\} \rightarrow \{s'\})}{p(\leftarrow)} \approx \frac{w(\{s'\})}{w(\{s\})}$

Detailed balance: s.S. 31 unten.

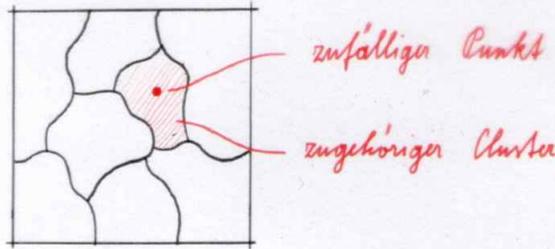


Abbildung 3.4: Swendsen Wang Cluster mit zufällig ausgewähltem Gitterpunkt

Swendsen-Wang - Single Cluster Alg.:

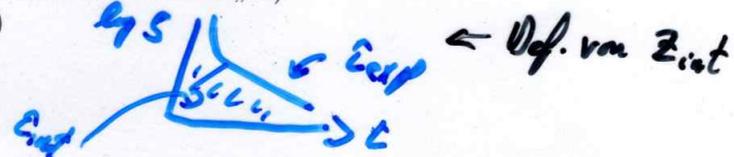
1. Zufälligen Platz auswählen
2. Cluster um diesen Platz herum konstruieren (und Bonds setzen)
3. Flip bonds cluster

- Vorteil: Die Wahrscheinlichkeit, dass der Zufällig gewählte Platz in einem Cluster liegt ist proportional zum Volumen des Clusters → im Mittel werden größere Cluster bestimmt → im Mittel größere Änderung der Spin Konfiguration.

Tatsächlich: kleinere Autokorrelationen (kleinerer Wert von „z“)

Autokorrelationen

$\tau_{int}(\mathcal{O}) \sim \xi_{int}^2(\mathcal{O})$ (genauer: $\sim \min(L, \xi)^2$)
 τ_{int} - Integrierte Autokorrelationszeit
 $\mathcal{O} \dots$ Observable



τ_{int} wird benötigt, um die wahre Varianz einer Observablen zu bestimmen:

$$\text{Var. Mittelwert}(\bar{\mathcal{O}}) = \frac{2\tau_{int}}{n} \text{naive Varianz}(\mathcal{O}_i)$$

(→ Skript Computersimulationen)

$\tau(\mathcal{O}) \sim \min(L, \xi)^2$

Vergleich von τ_{int} (Energie) der verschiedenen Algorithmen am Ising Modell:

Dimension	Metropolis	Single Spin Flip	Swendsen Wang	Single Cluster (Wolff Cluster)
d = 2	≈ 2.17	600	≈ 0.25*	≈ 0.25*
d = 3	≈ 2.02	2300	≈ 0.54	≈ 0.33
d = 4	≈ 2		≈ 0.9	≈ 0.25*

Resultate für Ising Simul.:

Werte mit * könnten auch einen logarithmischen Zusammenhang haben. Einheit von τ_{int} hier: „Sweep“ im Mittel und jeder Gitterplatz einmal behandelt.

sehr schwer zu unterscheiden.

Beispiel: $L=128, \tau_c, \tau_{int}(R) | \tau_{int}(M), d=2 (\tau(M) \approx 70.000)$

3.9 Simulation unendlich großer Systeme mit Cluster-Verfahren (!)

3.9.1 Endlich große Systeme

Periodic boundary condition (p.b.c.): Spin-Korrelationsfunktion $G(r) = \langle s_j s_{j+r} \rangle = \sum_i c_i e^{r/\xi_i}$ ist eine Summe von Exponentialfunktionen. Für große r dominiert die Exponentialfunktion mit größtem ξ_i . Mit p.b.c. ist das System symmetrisch um $r = \frac{L}{2}$ und somit ist:

$G(r) \sim e^{-r/\xi} + e^{-(L-r)/\xi} = e^{-0.5L/\xi} \cosh\left(\frac{r-0.5L}{\xi}\right)$ bei $r \gg \xi$

Extrapolation zu $L \rightarrow \infty$ ist schwierig (siehe Abb. 3.6) (→ „Finite Size Scaling“ gibt Information über kritischen Exponenten).

Detailed balance des Single-Cluster-Verfahrens: Übergang von Spin-Konfiguration S zu S' und umgekehrt:

- Zu diesem Übergang korrespondiert der Flip eines spezifischen Clusters.
- $p(S \rightarrow S') = p(\text{Anfangspunkt innerhalb des Clusters}) \cdot p(\text{Konstruktion des Clusters})$
- $p(S' \rightarrow S) = p(\text{Anfangspunkt innerhalb des Clusters}) \cdot p(\text{Konstruktion desselben Clusters})$

- 1) $p(\text{Anfangspunkt})$ ist gleich.
- 2) $p(\text{Konstruktion des Clusters}) = p(\text{Bonds im Inneren})$ (ist gleich, weil Nachbarspins gleich bleiben) $\cdot p(\text{Konstruktion des Rands})$ (siehe z.B. Clusterbild Seite 27)
- 3) Konstruktion des Rands bedeutet, an Randbonds KEINEN Bond zu setzen. Vor Clusterflip sind z.B. die beiden Spins eines Randbonds gleich. Dann $p(\text{kein Bond}) = \exp(-2\beta)$. Nach Clusterflip sind die Spins verschieden. Dann $p(\text{kein Bond}) = 1$.

Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten = $\exp(-2\beta)$ = Verhältnis der Boltzmann Gewichte auf dem Randbond !!

- 4) Gesamt: Produkt der Boltzmann gewichte bzw. der Wahrscheinlichkeiten auf den Randbonds ==> Detailed Balance erfüllt.

→ Kap 4

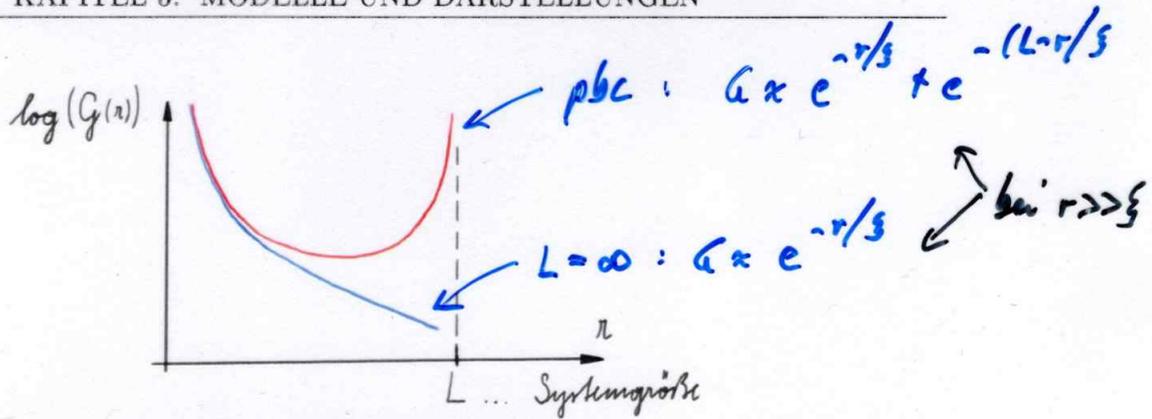


Abbildung 3.5: Spin-Korrelationsfunktion semilogarithmisch über dem Abstand zweier Spins

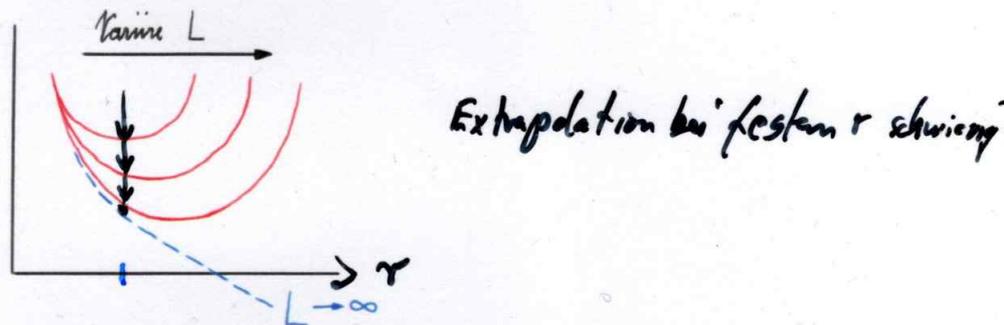


Abbildung 3.6: Spin-Korrelationsfunktion semilogarithmisch über dem Abstand zweier Spins. Das System ist jeweils um $r = \frac{L}{2}$ symmetrisch. Der anfängliche exponentielle Abfall nähert sich von oben der Korrelationsfunktion für $L \rightarrow \infty$

3.9.2 Unendlich große Systeme

Unendliches Spin-System =
Ausschnitt des unendl. großen Systems! Kann relat. klein bleiben (s.u.)

Basiert auf dem Single-Cluster-Verfahren (endliche Größe):

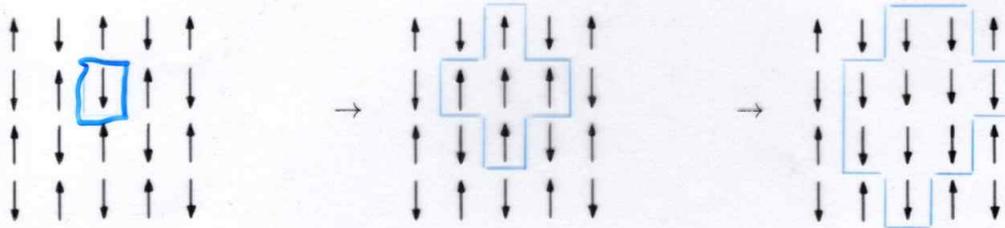
1. Starte immer mit dem selben Startpunkt „0“ (in der Mitte des Systems). Dies ist möglich da ein unendlich großes System translationsinvariant ist.
2. Anfangskonfiguration der Spins: ~~Neel~~ Neel Konfiguration (Nachbarspins sind immer antiparallel). Die Anfangskonfiguration sollte keine ferromagnetische Konfiguration sein, denn sonst könnte der Cluster unendlich groß werden, obwohl die Temperatur höher als die kritische Temperatur ist.
3. Berechne den Cluster und update ^{Spins} ihn und wiederhole diesen Schritt immer wieder (vgl. Abbildung 3.7).

Nach n Schritten konnte maximal eine Distanz von n vom Anfangszustand erreicht werden (Bei Neel Konfiguration als Startkonfiguration; Distanz wird exakt erreicht wenn $p = 1 \rightarrow T = 0$)

$T \gg 0$, z.B. $T \approx T_c$ Cluster

Von Interesse ist meist $T \sim T_c$, dann wächst die maximale ~~Gitter~~ Größe langsam (siehe unten).

Die Umgebung des Startpunktes equilibriert relativ schnell, jedoch brauchen weiter entfernte Punkte länger zum equilibrieren, da der Cluster nicht jedes mal bis dorthin wächst (Korrelationsfunktion für Spins im Abstand r : $\langle s_0 s_r \rangle = \langle \delta(0 \text{ und } r \text{ im selben Cluster}) \rangle \sim e^{-r/\xi}$ bei großen Abständen)



Tatsächl.
gespeicherte
Systemgröße
wird bei Bedarf
vergrößert, z.B.
40 → 50

Abbildung 3.7: Beispiel des Algorithmus. Zuerst wird beim System der mittlere Spin ausgewählt, der zugehörige Cluster bestimmt (wie beim Single-Cluster-Verfahren) und dann der Cluster gedreht. Dieses Vorgehen wird wiederholt.

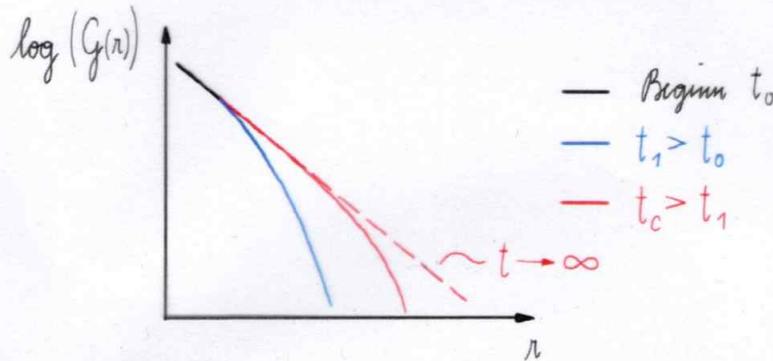


Abbildung 3.8: Spin-Korrelationsfunktion semilogarithmisch zu verschiedenen Laufzeiten. Die Messpunkte nähern sich von unten an die Spin-Korrelationsfunktion des unendlich großen Systems an.

Im equilibrierten Bereich ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Cluster den Abstand r erreicht (= irgendein Spin mit Abstand r), gleich $\langle s_0 s_r \rangle \sim r e^{-r/\xi}$. Somit equilibriert mit fortschreitender MC-Zeit eine immer größere Region um den Anfangspunkt. Wird der Rand des endlichen Systems erreicht (was einen Ausschnitt des unendlich großen System darstellt) so muss das System mitwachsen. Jedoch wird das System nicht größer als ca. $L \sim 2 \cdot 10\xi$, da $e^{-10} \approx 0.04\%$.

10ξ → 10ξ

Die logarithmische Spin-Korrelationsfunktion nähert sich bei diesem Verfahren von unten an die des unendlich großen Systems an (vgl. Abbildung 3.8) (im Gegensatz zum System mit p.b.c.).

Einschränkungen:

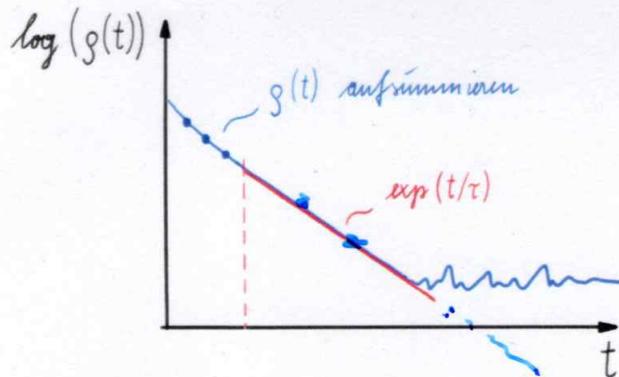
- $T > T_c$ da sonst Clustergröße divergiert
- Es muss eine Swendsen-Wang-artige Cluster-Darstellung geben (Ising-Modell, Potts-Modell, Spin $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Modell, Loop-Algorithmus; alle ohne Magnetfeld)
- Funktioniert nicht bei frustrierten Modellen



Um die Autokorrelationsfunktion zu berechnen wird über jeden einzelnen Punkt Statistik geführt. Es werden erst Messpunkte für einen Punkt erhoben, wenn das System an diesem Punkt anfängt zu equilibrieren, z.B. wenn der Spin schon z.B. 10 mal gedreht wurde (anstatt der Thermalisierung).

τ_{int} wird folgendermaßen bestimmt (vgl. Abbildung 3.9) $\tau_{int} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{max} \rho(t) (1 - \frac{t}{N})$

Die ersten Datenpunkte ($\rho(t < t_1)$) können so verwendet werden. Nach t_1 werden die Daten mit einer Exponentialfunktion genähert ($\sum_{t=t_1}^{t_{max}} c e^{-t/\tau} = c \sum_{t=t_1}^{t_{max}} (e^{-1/\tau})^t \approx c\tau$) und die Datenpunkte, die nur noch aus Rauschen bestehen, werden verworfen.



*vgl. Skript
Computersimulationen*

Abbildung 3.9: Um τ_{int} zu bestimmen, wird die logarithmische Autokorrelation in 3 Teile unterteilt. Im ersten Teil werden die Daten einfach addiert, im zweiten werden sie mit einer Exponentialfunktion genähert und die Daten im dritten Bereich werden verworfen.

3.10 Systeme mit Magnetfeld ($h > 0$)

2 Möglichkeiten:

L →

S relativ klein

==> kleine Autokorrelationszeiten

1) Ghost-Spin

Erweitere den Hamilton mit einem Ghost-Spin $s_0 = 1$

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i s_0 \quad s_0 = 1 \quad (3.17)$$

Jeder Spin koppelt mit dem Ghost-Spin s_0 mit Stärke h . Formalismus wie zuvor (Cluster-Methoden) kann beinahe unverändert beibehalten werden. Da der Ghost-Spin immer Wert +1 hat, kann ein Cluster, der den Ghost-Spin beinhaltet, nicht gedreht werden. Deshalb kann man die Clustererstellung abbrechen, sobald man auf s_0 trifft. Der Ghost-Spin kann auch mehrere eigentlich getrennte Cluster mit Spin +1 miteinander verbinden.

Bei großen βh sind die meisten Gitterplätze mit s_0 verbunden was gleichbedeutend mit einem magnetisierten System ist ($\langle M \rangle \approx 1$). Außerdem ist die Effizienz (empirisch) bei Swendsen-Wang und Single-Spin-Flip etwa gleich (mit niedrigen Autokorrelationszeiten).

p = 1/2

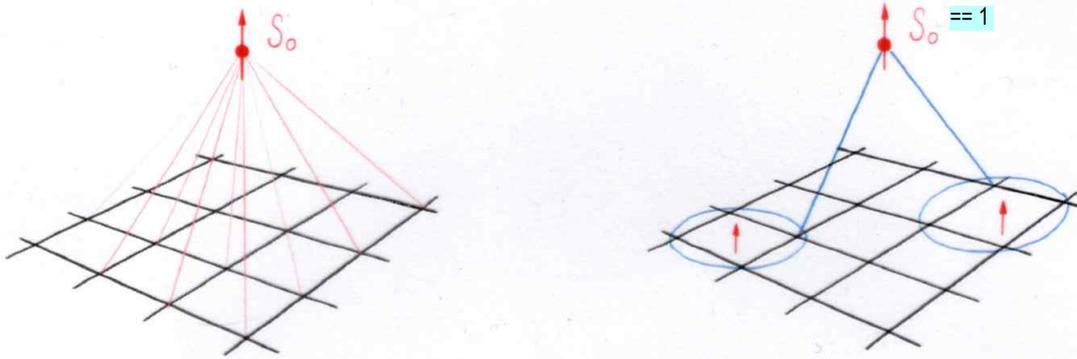


Abbildung 3.10: Ghost Spins sind mit allen Punkten im Gitter verbunden (Kopplungsstärke h). Es können daher eigentlich getrennte Cluster über den Ghost Spin verbunden sein.

2) Normale Cluster, geänderte Flipwahrscheinlichkeit

ESFK:

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{\{s_i\}} \sum_{\{g_{ij}\}} \sum_{\langle ij \rangle} e^{\beta \frac{e^{-\beta} e^{s_i s_j}}{(1-p)\delta_{g_{ij},0} + p\delta_{g_{ij},1} \delta_{s_i s_j}}} e^{+h \sum_i s_i} \\
 &= e^{-\beta N_k} \sum_{\{g_{ij}\}} \left(\frac{p}{1-p} \right)^{\#g_{ij}=1} \prod_{\text{Cluster}} \underbrace{(e^{hV_c} + e^{-hV_c})}_{=2^{\#\text{Cluster}} \text{ für } h=0}
 \end{aligned}
 \tag{3.18}$$

Mit dem Clustervolumen V_c .

Für Cluster-Algorithmus: Wechsel für

Spin \uparrow : $\frac{e^{hV_c}}{e^{hV_c} + e^{-hV_c}}$

Spin \downarrow : $\frac{e^{-hV_c}}{e^{hV_c} + e^{-hV_c}}$

Hand built

Weitere Alternativen

1. Geometrische Cluster Allgemein: behandle 2 Systeme gleichzeitig (eines mit h und eines mit $-h$)
2. „Wurm Algorithmus“ (später)

3.11 Berechnung von Korrelationsfunktion und Suszeptibilität in Cluster-Darstellung

3.11.1 Swendsen-Wang

Die Korrelationsfunktion berechnet sich wie in der Fortuin-Kasteleyn Darstellung *gefunden* definiert:

$\langle s_i s_j \rangle = \langle \delta(\text{Platz } i \text{ und } j \text{ im selben Cluster}) \rangle_{FK}$

Für die Suszeptibilität χ gilt:

$$\begin{aligned}
 \chi &= \beta \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) \stackrel{h=0}{=} \beta \langle M^2 \rangle && \text{bei } T > T_c \\
 &= \beta \left\langle \left(\sum_i s_i \right) \left(\sum_j s_j \right) \right\rangle \\
 &\stackrel{\text{(Wechsel auf Bond-Darstellung)}}{=} \beta \left\langle \sum_{\text{Cluster}} \sum_{i \text{ in Cluster}} \sum_j s_i s_j \right\rangle && \text{nur die Plätze } j \text{ im Cluster (demselben wie für Platz } i) \text{ tragen bei!} \\
 &= \beta \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} p_s \sum_{\text{Cluster}} \sum_{i \text{ in Cluster}} \sum_j s_i s_j && \text{(diese Zeile ist unnötig)}
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

• i und j in unterschiedlichen Clustern
 $s_i s_j = \{1, 1, -1, -1\} \rightarrow \sum_{\{s\}} \dots = 0$

• i und j im selben Cluster
 $s_i s_j = 1 \rightarrow \sum_j s_i s_j = V_C \leftarrow = \text{Volumen des Clusters} \approx \text{Anzahl Plätze im Cluster}$

$$\chi = \beta \left\langle \sum_{\text{Cluster}} \sum_{i \text{ in Cluster}} V_C \right\rangle = \beta \left\langle \sum_{\text{Cluster}} V_C \right\rangle \tag{3.20}$$

Improved(!) estimator: Summe über positive Zahlen, statt Summe über $s_i s_j$

3.11.2 Single Cluster

Korrelationsfunktion und Suszeptibilität:

$$G(i, j) = G(i - j) = \langle s_i s_j \rangle = \left\langle \frac{1}{V_C} \delta(\text{Platz } i \text{ und } j \text{ im Single-Cluster}) \right\rangle \tag{3.21}$$

$$\chi \approx \beta \langle M^2 \rangle = \beta \sum_{ij} \langle s_i s_j \rangle = \beta \langle V_C \rangle \tag{3.22}$$

3.11.3

Energie: Für Systeme ohne Magnetfeld ($h=0$) auf einem Quadratgitter lässt sich die Energie $E = \langle H \rangle$ über die Korrelationsfunktion im Abstand $r=1$ ausdrücken. Die Summe über alle Nachbarpaare $\langle ij \rangle$ in der Hamiltonfunktion kann wie folgt umgeformt werden:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = -J \sum_i (s_i s_{i+e_x} + s_i s_{i+e_y}) \tag{3.23}$$

wobei $i + e_x$ und $i + e_y$ den Nachbarplätzen von i in $+x$ bzw. $+y$ Richtung entsprechen. Für die Energie ergibt sich, unter Ausnutzung der Translationsinvarianz des Systems:

$$E = -J \sum_i (\langle s_i s_{i+e_x} \rangle + \langle s_i s_{i+e_y} \rangle) = -J \sum_i (G(1) + G(1)) = -2JV_G(1) \tag{3.24}$$

$$\frac{E}{V} = -2JG(1) \quad \text{für Ferromagnet} \tag{3.24}$$

Die Korrelationsfunktion $G(1)$ lässt sich sowohl in Spin-Darstellung ($G(r) = \langle s_i s_{i+r} \rangle = \langle O_s \rangle$) als auch in Bond-Darstellung (siehe (3.21), $G(r) = \langle O_b \rangle$) berechnen. Zweitere Methode ist aufgrund der kleineren Varianz der Observablen von Vorteil, wie man mit der Annahme $G(r) \propto e^{-r/\xi}$ für große Abstände sieht:

Spin-Bild:	$O_s \in \{\pm 1\}$,	$\text{var}(O_s) = \langle O_s^2 \rangle - \langle O_s \rangle^2 = \langle 1 \rangle - G(r)^2 \approx 1$, für r groß	*)
Bond-Bild:	$O_b \in \{0, 1\}$,	$\text{var}(O_b) = \langle O_b^2 \rangle - \langle O_b \rangle^2 = G(r) - G(r)^2 \approx G(r) \ll 1$	

(*) aber: mehr Spinpaare \rightarrow mehr Statistik

3.12 Cluster für $\mathcal{O}(N)$ -Modelle

Im ~~auf U-WOLFF zurückgehenden~~ $\mathcal{O}(N)$ -Modell ähnelt der Hamilton-Operator formal dem des Ising-Modells, jedoch mit **N-komponentigen (Spin-)Vektoren \vec{s}_i** anstelle der binären Spinvariablen s_i . Die **Dimension N der Spinvektoren ist dabei unabhängig von Dimension und Struktur des Raumgitters.**

normierte Vektoren

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \tag{3.25}$$

$$\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = |\vec{s}_i| |\vec{s}_j| \cos(\theta_{ij}) \tag{3.26}$$

≤ 1

Beispiele:	N	Spin-Komponenten	Beschreibung
	3	(x,y,z)	$\mathcal{O}(3)$ -Modell
	2	(x,y)	$\mathcal{O}(2)$ -Modell \equiv XY-Modell
	1	(x)	$\mathcal{O}(1)$ -Modell \equiv Z(2) \equiv Ising-Modell



Cluster-Algorithmus

Basiert auf der stochastischen Einbettung eines Ising-Modells. Für jedes Update:

- Wähle zufällig eine Richtung $\vec{R} \in \mathcal{O}(N)$. $|\vec{R}| = 1$.
- Projiziere alle Spins auf \vec{R} :

$$\vec{s}_i = \vec{s}_i^{\parallel} + \vec{s}_i^{\perp} \quad \text{mit} \quad \vec{s}_i^{\parallel} = (\vec{s}_i \cdot \vec{R}) \vec{R}, \quad \vec{s}_i^{\perp} = \vec{s}_i - \vec{s}_i^{\parallel}$$



Ising Variable (bzw. Update) \equiv Flip der projizierten Spinkomponente \vec{s}_i^{\parallel} auf $-\vec{s}_i^{\parallel}$ und vice versa (siehe Abb. 3.11). Auswirkung auf die Hamiltonfunktion:

$$H = -J \sum_{ij} (\vec{s}_i^{\parallel} \cdot \vec{s}_j^{\parallel} + \underbrace{\vec{s}_i^{\perp} \cdot \vec{s}_j^{\perp}}_{\text{bleibt bei Update konstant}}) \tag{3.27}$$

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \tau_i \tau_j + const \tag{3.28}$$

mit $\tau_i, \tau_j \in \{-1, 1\}$ und $J_{ij} = J |\vec{s}_i^{\parallel} \cdot \vec{s}_j^{\parallel}|$, was einem Ising-Modell mit Kopplungen J_{ij} entspricht.

- Cluster-Darstellung und Cluster-Update wie zuvor, jedoch mit Kopplungen J_{ij} , daher auch Flip-Wahrscheinlichkeit abhängig von i,j:

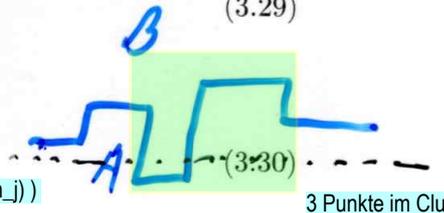
Bond-

$$p \rightarrow p_{ij} = 1 - e^{-2\beta J_{ij}} \tag{3.29}$$

Ähnlich: Höhen-Modelle "SOS - Solid on Solid"

$$h_i \in \mathbb{Z}$$

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} |h_i - h_j| \quad f(\text{Betrag}(h_i - h_j))$$



3 Punkte im Cluster

Hier: Wähle eine Referenzhöhe R (bzw. Referenzebene in 2D).

Update: Spiegelung an der Referenzebene R

} \rightarrow Ising eingebettet.

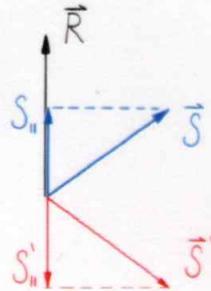


Abbildung 3.11: Ising-Update beim $\mathcal{O}(N)$ -Modell: Flip der Komponente S_{\parallel} parallel zur Referenzrichtung \vec{R} ergibt den neuen Spinvektor \vec{S}'

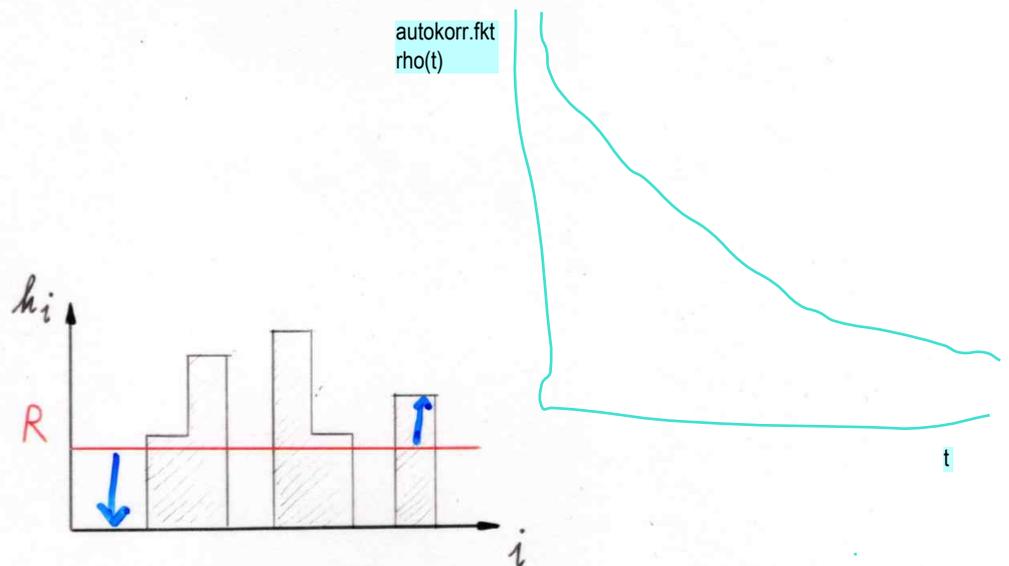


Abbildung 3.12: Veranschaulichung des Höhenmodells. Die rote Linie kennzeichnet die für ein Update gewählte Referenzhöhe R .