

Kapitel 8

Transfermatrizen

In den Kapiteln 2 und 5 haben wir klassische Feldtheorien in $d - 1$ Raumdimensionen über den Funktionalintegralformalismus quantisiert und sind durch die analytische Fortsetzung der Vakuumerwartungswerte zur euklidischen Formulierung der quantisierten Systeme gelangt. Diese hatte die Interpretation eines klassischen statistischen Systems in d Dimensionen. Die Diskretisierung der Funktionalintegrale führte uns schließlich zu den Gittertheorien. In diesem Kapitel gehen wir teilweise den umgekehrten Weg. Ausgehend von einer Gittertheorie soll ein Zustandsraum und ein Hamilton-Operator konstruiert werden, der im Kontinuumslimit gegen den Hamilton-Operator der ursprünglichen Theorie konvergiert. Der Formalismus zeigt den Übergang vom Gittermodell zur entsprechenden Quantenfeldtheorie. Die dabei vorgestellte Transfermatrix-Methode ist in Gitterfeldtheorien und Spinmodellen gleichermaßen einsetzbar. Dies wird im vorliegenden Kapitel anhand einfacher eindimensionaler Spinmodelle, auch Spinketten genannt, und Skalarfeldtheorien illustriert.

8.1 Ising-Kette

Wir werden zunächst die Transfermatrix über die einfache Isingkette einführen. Anschließend wird der Transfermatrix-Formalismus allgemein behandelt. In seiner Dissertation untersuchte ERNST ISING 1928 die lineare Kette von magnetischen Momenten oder „Spins“ [38]. Ising-spins können, wie in der folgenden Abbildung gezeigt, durch in zwei entgegengesetzte Richtungen zeigende Vektoren dargestellt werden.

$$\begin{array}{cccccccccccccccc} s_x : & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ x : & 1 & 2 & 3 & & & & & & & & & & & & N \end{array}$$

Wir betrachten ein *eindimensionales* endliches Gitter $\Lambda \subset \mathbb{Z}$ bestehend aus N Gitterpunkten. Auf jedem Gitterpunkt x lebt ein Spin $s_x \in \{\uparrow, \downarrow\}$ oder $s_x \in \{1, -1\}$. Ein

Zustand des Systems wird spezifiziert durch eine Konfiguration $w = \{s_1, \dots, s_N\}$. Wir wählen periodische Randbedingungen, so dass 1 und N nächste Nachbarn sind. Für die Isingkette vereinfacht sich die Energiefunktion (6.2) zu

$$H_\Lambda(w) = -J \sum_{x=1}^N s_x s_{x+1} - h \sum_{x=1}^N s_x. \quad (8.1)$$

Zur Berechnung der Zustandssumme schreiben wir diese wie folgt um,

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(\beta) &= \sum_w e^{-\beta H_\Lambda(w)} = \sum_{s_1, \dots, s_N} e^{K s_1 s_2 + \frac{1}{2} \beta h (s_1 + s_2)} \cdot e^{K s_2 s_3 + \frac{1}{2} \beta h (s_2 + s_3)} \dots \\ &= \sum_{s_1, \dots, s_N} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_N s_1} = \text{tr } T^N, \quad K = \beta J. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Hier wurde eine zweidimensionale *Transfermatrix* so definiert, daß ihre Elemente durch

$$\langle s | \hat{T} | s' \rangle = e^{K s s' + \frac{1}{2} \beta h (s + s')} \quad (8.3)$$

gegeben sind, wobei s und s' unabhängig die Werte ± 1 annehmen können. Die explizite Darstellung der *Transfermatrix* lautet

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{K+\beta h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-\beta h} \end{pmatrix}. \quad (8.4)$$

Sie ist symmetrisch und positivitätserhaltend, $\hat{T} = \hat{T}^\dagger$ und $T_{ss'} > 0$. Zur weiteren Auswertung diagonalisieren wir \hat{T} mit einer Drehung R ,

$$\hat{T} = R D R^{-1}, \quad R = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma \\ \sin \gamma & \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}. \quad (8.5)$$

Die beiden reellen Eigenwerte sind positiv,

$$\lambda_\pm = e^K \left(\cosh \beta h \pm \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}} \right), \quad (8.6)$$

und λ_+ ist der größere Eigenwert. Der Drehwinkel γ in (8.5) ist bestimmt durch

$$\sin 2\gamma = \frac{e^{-2K}}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}}}, \quad \cos 2\gamma = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}}}. \quad (8.7)$$

Benutzt man dies im Ausdruck (8.2) für die Zustandssumme dann ergibt sich

$$Z_\Lambda(\beta, h) = \text{tr } \hat{T}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N (1 + p^N), \quad p = \frac{\lambda_-}{\lambda_+} < 1. \quad (8.8)$$

Wichtige Größen der Thermodynamik sind damit schon allein durch die Eigenwerte der Transfermatrix bestimmt. Zum Beispiel ist die *freie Energiedichte*

$$f_\Lambda(\beta, h) = \frac{1}{N} F_\Lambda(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+ - \frac{1}{\beta N} \log(1 + p^N). \quad (8.9)$$

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ strebt p^N gegen Null und f ist proportional zum Logarithmus des größten Eigenwertes der Transfermatrix,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f_\Lambda(\beta, h) = f(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+. \quad (8.10)$$

Die *innere Energiedichte* $u_\Lambda = U_\Lambda/N$ wird mit (6.29) zu

$$u_\Lambda(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\log \lambda_+ + \frac{1}{N} \log(1 + p^N) \right). \quad (8.11)$$

Für ein verschwindendes Magnetfeld $h = 0$ oder im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ vereinfacht sich die Formel wie folgt,

$$\begin{aligned} u_\Lambda(\beta, 0) &= -\tanh K \left(\frac{1 + (\tanh K)^{N-2}}{1 + (\tanh K)^N} \right) \\ u(\beta, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} u_\Lambda(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \lambda_+. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Für die unendlich ausgedehnte Isingkette mit ausgeschaltetem Magnetfeld ist $u(\beta, 0) = -\tan K$. Die Magnetisierung berechnet sich mit Hilfe der Transfermatrix,

$$\begin{aligned} m &= \langle s_1 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_w e^{-\beta H} s_1 \\ &= \frac{1}{Z} \sum_w s_1 T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_N s_1} = \frac{1}{Z} \text{tr } S \hat{T}^N, \end{aligned} \quad (8.13)$$

wobei $S = \sigma_3$ die dritte Pauli-Matrix ist. Wegen $\hat{T} = RDR^{-1}$ und der Zyklizität der Spur erhalten wir

$$m = \frac{1}{Z} \text{tr } (R^{-1} S R D^N) \quad \text{mit} \quad R^{-1} S R = \begin{pmatrix} \cos 2\gamma & -\sin 2\gamma \\ -\sin 2\gamma & -\cos 2\gamma \end{pmatrix}. \quad (8.14)$$

Mit der obigen Form für die diagonalisierte Transfermatrix finden wir das Resultat

$$m = \frac{1 - p^N}{1 + p^N} \cos 2\gamma \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}}}. \quad (8.15)$$

Nach (6.30) erhält man die Magnetisierung auch durch Ableiten der freien Energiedichte (8.9) nach dem Magnetfeld. Schaltet man das Magnetfeld aus, so verschwindet die Magnetisierung (8.15) für alle positiven Temperaturen. Im eindimensionalen Ising-Modell gibt es also keine spontane Magnetisierung. Man kann zeigen, dass *alle* Spinketten mit kurzreichweitiger Wechselwirkung zwischen den Spins keine spontane Symmetrie-Brechung zeigen.

Für die 2-Punktsfunktion findet man auf ähnliche Art für $y \geq x$ die Formel

$$\begin{aligned} \langle s_x s_y \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_w e^{-\beta H} s_x s_y \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_1, s_x, s_y} (T^{x-1})_{s_1 s_x} s_x (T^{y-x})_{s_x s_y} s_y (T^{N+1-y})_{s_y s_1} \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left(S \hat{T}^{y-x} S \hat{T}^{N-(y-x)} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left((R^{-1} S R) D^{y-x} (R^{-1} S R) D^{N-(y-x)} \right) \end{aligned} \quad (8.16)$$

mit den in (8.5,8.14) eingeführten Matrizen D und $R^{-1}SR$. Eine kurze Rechnung liefert

$$\langle s_x s_y \rangle = \cos^2 2\gamma + \frac{p^{y-x} + p^{N-(y-x)}}{1 + p^N} \sin^2 2\gamma, \quad y \geq x. \quad (8.17)$$

Wegen der Translationsinvarianz auf dem periodischen Gitter und der Symmetrie $\langle s_x s_y \rangle = \langle s_y s_x \rangle$ hängt die Zweipunktsfunktion wie erwartet nur vom Abstand $|y - x|$ von x und y ab. Im thermodynamischen Grenzfall gilt

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle s_x s_y \rangle &= \cos^2 2\gamma + e^{-|y-x|/\xi} \sin^2 2\gamma \\ \text{mit } \xi^{-1} &= \log \frac{1}{p} \xrightarrow{h \rightarrow 0} -\log \tanh K. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Für alle positiven Temperaturen ist die Korrelationslänge ξ endlich. Es gilt die *Clustereigenschaft*,

$$\langle s_x s_y \rangle - \underbrace{\langle s_x \rangle \langle s_y \rangle}_{=m^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sin^2 2\gamma e^{-|y-x|/\xi} \xrightarrow{|y-x| \rightarrow \infty} 0. \quad (8.19)$$

Das 1-dimensionale Ising-Modell hat keine geordnete Phase für $T > 0$. Nur für eine verschwindende absolute Temperatur sind (abhängig von der Reihenfolge der Grenzübergänge) alle Spins auch ohne Magnetfeld parallel ausgerichtet. Das mag verwunderlich erscheinen, da der Zustand $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots$, d.h. $s_x = 1$ für alle Gitterpunkte x , die niedrigste Energie hat (entartet mit $s_x = -1$ für alle x). Dieser Zustand hat aber nicht die niedrigste *freie Energie* $F = U - TS$. Um dies zu zeigen, betrachten wir eine Konfiguration wie $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$, bei der die Spins teilweise umgedreht sind. Die Trennwand zwischen den beiden Bereichen erhöht die Energie um $\Delta U = 2$, sie kann aber an N Stellen liegen. Der Entropiegewinn ist $\Delta S = k \log N$. Dies bedeutet, dass bei $T \neq 0$ die freie Energie des Systems durch die Trennwand abgesenkt ist. Später werden wir Modelle in mehr als einer Dimension untersuchen. Dann werden wir Phasenübergänge und spontan gebrochene Phasen bei endlichen Temperaturen finden.

8.1.1 Der „Hamilton-Operator“

Nun gehen wir teilweise den umgekehrten Weg wie in den Kapitel 2 und 5 und extrahieren einen Operator \hat{H} über die Beziehung

$$\hat{T} = e^{-\hat{H}}. \quad (8.20)$$

Da \hat{T} positiv ist, kann \hat{H} hermitesch gewählt werden. Die Matrix \hat{H} ist eine Art diskreter *Hamilton-Operator* für das betrachtete Spinsystem. Für Gitterfeldtheorien sollte er im Kontinuumsimes gegen den Hamilton-Operator der entsprechenden Quantenfeldtheorie streben. Mit Hilfe der Formel

$$\exp\left(\alpha \sum_i n_i \sigma_i\right) = \cosh \alpha + \sinh \alpha \sum_{i=1}^3 n_i \sigma_i, \quad (8.21)$$

wobei σ_i die Pauli-Matrizen sind, lässt sich die Berechnung von \hat{H} geschlossen ausführen. Der Einfachheit halber betrachten wir den Fall $h = 0$, für den die Transfermatrix (8.4) die folgende einfache Form annimmt

$$\hat{T} = e^K \mathbb{1} + e^{-K} \sigma_1 = \frac{e^K}{\cosh K^*} e^{K^* \sigma_1}, \quad K = \beta J. \quad (8.22)$$

Hier haben wir die sogenannte *duale Kopplung* K^* über die Relation

$$\tanh K^* = e^{-2K} \iff \tanh K = e^{-2K^*}. \quad (8.23)$$

eingeführt. Wir erhalten also für den *Hamilton-Operator*

$$\hat{H} = -K + \log \cosh K^* - K^* \sigma_1 = E_0 + K^*(1 - \sigma_1), \quad (8.24)$$

mit Grundzustandsenergie $E_0 = \log \cosh K^* - K - K^*$. Mit Hilfe von (8.22) schreibt sich diese gemäss

$$E_0 = -\log(2 \cosh K) = \beta f(\beta, h = 0). \quad (8.25)$$

Der renormierte Hamilton-Operator \hat{H}' mit der Grundzustandsenergie 0 lautet

$$\hat{H}' = \hat{H} - E_0 = K^*(1 - \sigma_1). \quad (8.26)$$

Der einzige angeregte Energieeigenwert liegt $2K^*$ über dem Grundzustand und bestimmt die Korrelationslänge der Zweipunktfunktion $\langle s_x s_y \rangle$.

8.1.2 Die anti-ferromagnetische Kette

Für $J < 0$ werden Konfigurationen mit antiparallelen benachbarten Spins energetisch begünstigt. Solche Systeme heißen „Anti-Ferromagnete“. Ohne Magnetfeld und für negatives J vereinfachen sich die die Ausdrücke (8.6) für die Eigenwerte der Transfermatrix zu

$$\lambda_+ = 2 \cos(K) > 0 \quad \text{und} \quad \lambda_- = 2 \sin(K) < 0 \quad \text{für} \quad J < 0. \quad (8.27)$$

Die Eigenwerte der Transfermatrix sind nicht mehr alle positiv. Die freie Energie, die durch den betragsmäßig maximalen Eigenwert bestimmt wird, ist davon allerdings nicht betroffen. Ohne Magnetfeld ist $\cos(2\gamma) = 0$ und $\sin(2\gamma) = 1$ in (8.7) und die Korrelationsfunktion (8.18) hat die einfache Form

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle s_x s_y \rangle = (\tanh K)^{|y-x|} = (-1)^{|y-x|} (\tanh |K|)^{|y-x|}. \quad (8.28)$$

Sie hat auf benachbarten Gitterpunkten verschiedene Vorzeichen. Die \hat{T} -Matrix ist nicht mehr durch $\exp(\hat{H})$ mit einer hermiteschen Matrix \hat{H} gegeben, da \hat{T} keine positive Matrix ist. Das langreichweitige Verhalten des Isingmodells lässt sich jedoch auch durch die Matrix \hat{T} beschreiben. Dies ist eine positive Matrix und wir können

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \log \hat{T}^2 \quad (8.29)$$

definieren. \hat{H} ist identisch zum Hamilton-Operator der gewöhnlichen Isingkette.

8.2 Potts-kette

Eine Konfiguration $w = \{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ des eindimensionalen Pottsmodells hat die Energie

$$H_\Lambda(w) = -J \sum_x \delta(\sigma_{x+1}, \sigma_x) - 2h \sum_x \delta(\sigma_x, 1), \quad (8.30)$$

wobei wir periodischen Randbedingungen wählen. Bei der Berechnung der Zustandssumme

$$Z_\Lambda(\beta, J, h) = \sum_w e^{-\beta H(w)} \quad (8.31)$$

machen wir Gebrauch von der Transfermatrix-Methode. Eine Wahl für diese Matrix ist

$$(T_{\sigma\sigma'}) = \langle \sigma | \hat{T} | \sigma' \rangle = \begin{pmatrix} \zeta z & z & \dots & z \\ 1 & \zeta & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & \zeta \end{pmatrix}, \quad \zeta = e^{\beta J}, \quad z = e^{2\beta h}. \quad (8.32)$$

Zur Bestimmung der Eigenwerte berechnen wir das charakteristische Polynom. Dazu ziehen wir die zweite Reihe von $\hat{T} - \lambda \mathbb{1}$ von den darunterliegenden Reihen ab. Danach addieren wir die dritte und alle nachfolgenden Spalten zur zweiten Spalte. Auf diese Weise finden wir

$$\begin{aligned} \det(\hat{T} - \lambda \mathbb{1}) &= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z(q-1) & z & \dots & z \\ 1 & \zeta + q' - \lambda & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & \zeta - 1 - \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & & 0 & \dots & \zeta - 1 - \lambda \end{pmatrix} \\ &= \{\lambda^2 - (\zeta z + \zeta + q')\lambda + z(\zeta - 1)(\zeta + q - 1)\} \{\zeta - 1 - \lambda\}^{q-2}, \end{aligned}$$

wobei $q' = q - 2$ für das Isingmodell verschwindet. Dies führt auf den q' -fach entarteten Eigenwert $\zeta - 1$ und die einfachen Eigenwerte λ_\pm , die Wurzeln der quadratischen Gleichung

$$\lambda^2 - (\zeta z + \zeta + q')\lambda + z(\zeta - 1)(\zeta + q - 1) = 0. \quad (8.33)$$

Es ergibt sich der folgende explizite Ausdruck für die Zustandssumme

$$Z_\Lambda(\zeta, z) = \text{tr} \hat{T}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N + q'(\zeta - 1)^N, \quad (8.34)$$

mit den Eigenwerten der Transfermatrix

$$\begin{aligned}\lambda_{\pm} &= \frac{1}{2} \left((z+1)\zeta + q' \pm \sqrt{(\zeta z - \zeta - q')^2 + 4(q-1)z} \right) \\ &= e^{\beta h} \left(e^{\beta J} \cosh \beta h + q' e^{-\beta h} \pm \sqrt{(e^{\beta J} \sinh \beta h - q' e^{-\beta h})^2 + (q-1)} \right). \quad (8.35)\end{aligned}$$

Für $q = 2$ verschwindet q' und die Zustandssumme proportional zu derjenigen des Isingmodells. Im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ werden die thermodynamischen Potentiale von dem größten Eigenwert λ_+ der Transfermatrix bestimmt. Zum Beispiel finden wir für die freie Energiedichte der Potts-kette mit q -wertiger Gittervariablen,

$$\begin{aligned}f(\beta J, \beta h) &= \beta(J+h) + \log \left(\cosh \beta h + q' e^{-\beta(J+h)} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(\sinh \beta h - q' e^{-\beta(J+h)})^2 + (q-1)e^{-2\beta J}} \right). \quad (8.36)\end{aligned}$$

8.3 Der allgemeine Formalismus

Der Formalismus lässt auf Spinsysteme anwenden deren Gitter die Form $\Lambda = \mathbb{Z} \times \mathcal{R}$ hat. Die durch \mathbb{Z} durchnummerierte Koordinate heißt manchmal „Zeit“-Richtung, der Teil \mathcal{R} „räumliches“ Gitter. Sei \mathbf{x} eine Durchnummerierung der Punkte von \mathcal{R} , so kennzeichnet $x = (\tau, \mathbf{x})$ mit $\tau \in \mathbb{Z}$ einen Punkt im gesamten Gitter. Eine Spinkonfiguration auf Λ kann als die Menge von Spinkonfigurationen auf dem räumlichen Gitter angesehen werden,

$$w = \{s_x | x \in \Lambda = \mathbb{Z} \times \mathcal{R}\} = \{w_\tau | \tau \in \mathbb{Z}\}, \quad \text{mit} \quad w_\tau = \{s_{\tau, \mathbf{x}} | \mathbf{x} \in \mathcal{R}\}. \quad (8.37)$$

Bei einem d -dimensionalen hyperkubischen Gitter Λ ist \mathcal{R} ein $d-1$ -dimensionales hyperkubisches Gitter. Auf diesen Fall wollen wir uns im Folgenden beschränken.

Wir konstruieren zunächst den „Hilbert-Raum“ der Zustände auf dem räumlichen Gitter, wobei wie früher \mathcal{T} der Targetraum der möglichen lokalen Zustände an einem Punkt bezeichnet. Für das Isingmodell ist $\mathcal{T} = \mathbb{Z}_2$ und bei einem ungeladenen Skalarfeld ist $\mathcal{T} = \mathbb{R}$. Nun definieren wir $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$ als den Vektorraum der komplexwertigen Funktionen über den lokalen Zuständen,

$$\mathcal{H}_{\mathbf{x}} = \{\psi | \psi : \mathcal{T} \rightarrow \mathbb{C}\}. \quad (8.38)$$

Die lokalen Zustände $s \in \mathcal{T}$ zeichnen eine mögliche Basis von $\mathcal{H}_{\mathbf{x}}$ aus:

$$|s\rangle = \psi_s \quad \text{mit} \quad \psi_s(s') = \delta_{s,s'}. \quad (8.39)$$

Diese Basis besteht also aus den charakteristischen Funktionen zu den Zuständen. Auf

dieser Basis definieren wir das Skalarprodukt

$$\langle s|s' \rangle = \delta_{s,s'}. \quad (8.40)$$

Ist der Targetraum diskret unendlich oder kontinuierlich, dann fordern wir ähnlich wie in der Quantenmechanik $\psi \in \ell_2$ oder $\psi \in L_2(\mathcal{T})$. Beim Isingmodell ist \mathcal{H}_x gleich dem zweidimensionalen Vektorraum \mathbb{C}^2 . Für ein reelles Skalarfeld ist $\mathcal{H}_x = L_2(\mathbb{R})$. Nun definieren wir zu dem räumlichen Gitter einen Zustandsraum

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{x \in \mathcal{R}} \mathcal{H}_x. \quad (8.41)$$

Es ist der Raum aller (komplexwertigen) Funktionen über den Konfigurationen (Zuständen) auf \mathcal{R} . Das Skalarprodukt auf \mathcal{H} ist das Produkt der Skalarprodukte in den Faktoren \mathcal{H}_x . Eine mögliche Basis in \mathcal{H} sind die Produktzustände

$$|\mathbf{w}\rangle = \bigotimes_{x \in \mathcal{R}} |s_x\rangle. \quad (8.42)$$

Im diskreten Fall sind dies die charakteristischen Funktionen auf einer Konfiguration zu fester „Zeit“ $\mathbf{w} = \{s_x | x \in \mathcal{R}\}$. Man bezeichnet diese Basis die „Konfigurationsraumbasis“. Entsprechend der Aufspaltung $\Lambda = \mathbb{Z} \times \mathcal{R}$ des Gitters spalten wir auch die Energiefunktion auf. Dabei setzen wir voraus, dass es nur Wechselwirkungsterme zwischen nächsten Nachbarn gibt,

$$H(\mathbf{w}) = \sum_{\tau} H_0(\mathbf{w}_{\tau+1}, \mathbf{w}_{\tau}) + \sum_{\tau} U(\mathbf{w}_{\tau}). \quad (8.43)$$

Der Anteil H_0 enthält die Wechselwirkungsterme zwischen Spins in benachbarten Zeitschichten des Gitters. Er ändert nicht bei Vertauschung der Konfigurationen, $H_0(\mathbf{w}', \mathbf{w}) = H_0(\mathbf{w}, \mathbf{w}')$. Mit unserer Annahme an die Wechselwirkungsterme gilt

$$H_0 = \sum_{\mathbf{x}} h_0(s_{\tau+1, \mathbf{x}}, s_{\tau, \mathbf{x}}) \quad \text{und} \quad U = \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} u(s_{\tau, \mathbf{x}}, s_{\tau, \mathbf{y}}) \quad (8.44)$$

Wir definieren nun die *Transfermatrix* als linearen Operator auf \mathcal{H} durch seine Matrixelemente in der Konfigurationsraumbasis

$$T_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'} = \langle \mathbf{w} | \hat{T} | \mathbf{w}' \rangle = e^{-\beta(H_0(\mathbf{w}, \mathbf{w}') + \frac{1}{2}U(\mathbf{w}) + \frac{1}{2}U(\mathbf{w}'))}. \quad (8.45)$$

Die so definierte Matrix \hat{T} ist reell und symmetrisch und hat reelle Eigenwerte. Die Matrixelemente von \hat{T} sind positiv und nach dem Satz von Frobenius-Perron (siehe nächsten

Abschnitt) ist der höchste Eigenwert λ_{\max} von \hat{T} positiv und nicht entartet. Sind nicht alle Eigenwerte λ_n von \hat{T} positiv wie beim Anti-Ferromagneten, dann wählt man die positive Matrix \hat{T}^2 um den *Quantenoperator* \hat{H} der Gittertheorie zu definieren,

$$\hat{T}^2 = e^{-2\hat{H}}, \quad \hat{H} \text{ selbstadjungiert.} \quad (8.46)$$

Für die Zustanssumme auf einem periodischen Gitter, welches in Zeitrichtung die Länge N hat, gilt

$$Z_\Lambda = \text{tr } \hat{T}^N = \sum_n \lambda_n^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_{\max}^N. \quad (8.47)$$

In der Konfigurationsraumbasis können wir in \mathcal{H} einen ausgezeichneten Satz von Operatoren definieren: die Operatoren \hat{s}_x , die in dieser Basis diagonal sind, und die Operatoren $\hat{\pi}_x$, die Basisvektoren in andere Basisvektoren abbilden, beispielsweise

$$\hat{s}_x |\mathbf{w}\rangle = s_x |\mathbf{w}\rangle \quad \text{und} \quad \hat{\pi}_x |\mathbf{w}\rangle = |\mathbf{w}_\delta\rangle. \quad (8.48)$$

Hier geht \mathbf{w}_δ aus \mathbf{w} durch eine Verschiebung von s_x hervor. $\hat{\pi}_x$ entspricht dem exponentierten Impulsoperator der Quantenmechanik, der Ortseigenzustände um eine Konstante verschiebt. Je nach Modell können die $\hat{\pi}_x$ eine andere Bedeutung haben. Für reelle s_x wird es die Addition einer Konstanten sein und für gruppenwertige s_x die Multiplikation mit einem (bei zyklischen Gruppen) generierenden Gruppenelement. Man kann nun jeden Operator auf \mathcal{H} durch die Operatoren \hat{s}_x und $\hat{\pi}_x$ ausdrücken.

Für die Isingkette besteht \mathcal{R} aus einem Punkt. Wählen wir die Basis

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.49)$$

dann sind die Matrizen \hat{s} und $\hat{\pi}$ durch

$$\hat{s} = \sigma_3 \quad \text{und} \quad \hat{\pi} = \sigma_1 \quad (8.50)$$

gegeben. Wie bereits bei der Isingkette gezeigt, lassen sich auch Erwartungswerte im Operatorformalismus ausdrücken, beispielsweise

$$\langle s_{\tau, \mathbf{x}} s_{\tau+\Delta, \mathbf{y}} \rangle = \frac{1}{\text{tr } \hat{T}^N} \text{tr} \left(\hat{s}_x \hat{T}^\Delta s_y \hat{T}^{N-\Delta} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_{\max}^{-\Delta} \langle 0 | \hat{s}_x \hat{T}^\Delta \hat{s}_y | 0 \rangle. \quad (8.51)$$

Im letzten Schritt haben wir ausgenutzt, dass im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ von allen Zuständen nur der Grundzustand $|0\rangle$ von \hat{H} , also der Zustand zum höchsten Eigenwert der Transfermatrix $\hat{T} = \exp(-\hat{H})$ beiträgt.

8.3.1 Transfermatrix für reelles Skalarfeld

Wir betrachten eine nicht-wechselwirkende skalare Gitterfeldtheorie mit Wirkung

$$S = \frac{1}{2} \sum_{\langle x, y \rangle} (\phi_x - \phi_y)^2 + \frac{m^2}{2} \sum_x \phi_x^2. \quad (8.52)$$

Die lokalen Freiheitsgrade sind reelle Felder $\phi_x \in \mathbb{R}$ und der Hilbert-Raum an jedem raumartigen Gitterpunkt ist gleich $L_2(\mathbb{R}) \simeq \{\psi(\phi)\}$. Der Hilbertraum ist entsprechend das Tensorprodukt dieser Räume, über alle Punkte des räumlichen Gitters, $\mathcal{H} = \otimes_{\mathbf{x} \in \mathcal{R}} L_2(\mathbb{R})$. Jeder Feldkonfiguration \mathbf{w} auf dem räumlichen Gitter entspricht ein Basisvektor $|\mathbf{w}\rangle$ in der Konfigurationsbasis von \mathcal{H} . Die Transfermatrix ist

$$\langle \mathbf{w} | \hat{T} | \mathbf{w}' \rangle = e^{-E(\mathbf{w}, \mathbf{w}')} \quad (8.53)$$

mit der (symmetrisierten) Energiebeitrag für den Übergang zwischen zwei Raumgittern,

$$\begin{aligned} E(\mathbf{w}, \mathbf{w}') &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} (\phi_{\mathbf{x}} - \phi'_{\mathbf{x}})^2 + \frac{m^2}{4} \sum_{\mathbf{x}} (\phi_{\mathbf{x}}^2 + \phi'_{\mathbf{x}}^2) \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \{(\phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{y}})^2 + (\phi'_{\mathbf{x}} - \phi'_{\mathbf{y}})^2\}. \end{aligned} \quad (8.54)$$

Die diagonalen Operatoren sind die Feldoperatoren,

$$\hat{\phi}_{\mathbf{x}} |\mathbf{w}\rangle = \phi_{\mathbf{x}} |\mathbf{w}\rangle, \quad |\mathbf{w}\rangle = |\{s_{\mathbf{x}} | \mathbf{x} \in \mathcal{R}\}\rangle \quad (8.55)$$

und die Verschiebungsoperatoren sind die Impulse,

$$\hat{\pi}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta \phi_{\mathbf{x}}} \implies [\hat{\phi}_{\mathbf{x}}, \hat{\pi}_{\mathbf{y}}] = i\delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (8.56)$$

Nun kann man wie bei der Isingkette die Transfermatrix durch diese Operatoren ausdrücken. Man erhält mit Hilfe der Identität

$$\langle \mathbf{w} | e^{-K(\hat{\pi})} | \mathbf{w}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{|\mathcal{R}|/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} (\phi_{\mathbf{x}} - \phi'_{\mathbf{x}})^2 \right\}, \quad (8.57)$$

wobei $K(\hat{\pi}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} \hat{\pi}_{\mathbf{x}}^2$ der kinetische Operator ist, folgende einfache Darstellung für die Matrixelemente der Transfermatrix

$$\langle \mathbf{w} | \hat{T} | \mathbf{w}' \rangle = (2\pi)^{|\mathcal{R}|/2} e^{-F(\hat{\phi})} e^{-K(\hat{\pi})} e^{-F(\hat{\phi})}. \quad (8.58)$$

Hierin tritt der in der Konfigurationsbasis diagonale Operator

$$F(\hat{\phi}) = \frac{1}{4} \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} (\hat{\phi}_{\mathbf{x}} - \hat{\phi}_{\mathbf{y}})^2 + \frac{m^2}{4} \sum_{\mathbf{x}} \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^2 \quad (8.59)$$

auf. Aus der Gestalt (8.58) kann man erkennen, dass \hat{T} nicht die Exponentialfunktion eines einfachen Operators \hat{H} ist. Nur im Kontinuumslimit (siehe später) geht \hat{H} über in den bekannten Hamilton-Operator des freien Skalarfeldes.

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \left(\hat{\pi}_{\mathbf{x}}^2 + m^2 \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^2 \right). \quad (8.60)$$

8.3.2 Satz von Frobenius

Bei der Lösung des eindimensionalen Ising-Modells spielt der größte Eigenwert λ_+ der Transfermatrix offensichtlich eine herausragende Rolle. Der folgende Satz macht Aussagen über die Eindeutigkeit dieses Eigenwertes und die Form des zugehörigen Eigenvektors.

Satz [Perron-Frobenius] *Es sei \hat{T} eine hermitesche Matrix mit positiven Matrixelementen T_{ij} . Dann hat \hat{T} einen eindeutigen Eigenvektor zum größten Eigenwert $\|\hat{T}\|$. Die Komponenten des Eigenvektors sind alle ungleich Null und können positiv gewählt werden.*

Beweis: Es sei $\|\psi\|^2 = \sum \psi_i^* \psi_i$ die quadrierte Norm des Vektors $\psi \in \mathbb{C}^n$. Die Norm einer $n \times n$ -Matrix \hat{T} ist

$$\|\hat{T}\| = \max_{\psi \neq 0} \frac{\|\hat{T}\psi\|}{\|\psi\|}. \quad (8.61)$$

Es sei nun $\tilde{\Omega} = (\tilde{\Omega}_1, \dots, \tilde{\Omega}_n)^T$ ein Vektor zum maximalen Eigenwert $\|\hat{T}\|$,

$$(\tilde{\Omega}, \hat{T}\tilde{\Omega}) = \|\hat{T}\|(\tilde{\Omega}, \tilde{\Omega}),$$

und $\Omega = (|\tilde{\Omega}_1|, \dots, |\tilde{\Omega}_n|)^T$. Die Vektoren $\tilde{\Omega}$ und Ω haben dieselbe Norm. Da nach Voraussetzung die Matrixelemente von \hat{T} nicht-negativ sind gilt offensichtlich

$$(\Omega, \hat{T}\Omega) \geq (\tilde{\Omega}, \hat{T}\tilde{\Omega}) = \|\hat{T}\|(\tilde{\Omega}, \tilde{\Omega}) = \|\hat{T}\|(\Omega, \Omega). \quad (8.62)$$

Mit der *Schwartzschen Ungleichung* folgt weiter

$$(\Omega, \hat{T}\Omega) \leq \|\Omega\| \|\hat{T}\Omega\| \leq \|\hat{T}\| \|\Omega\|^2 = \|\hat{T}\| \|\tilde{\Omega}\|^2 = \|\hat{T}\|(\Omega, \Omega). \quad (8.63)$$

Diese beiden Ungleichungen implizieren, dass

$$(\Omega, \hat{T}\Omega) = \|\hat{T}\| (\Omega, \Omega).$$

Damit ist Ω genauso wie $\tilde{\Omega}$ ein Eigenvektor zum maximalen Eigenwert von \hat{T} . Kein Element des reellen Eigenvektors Ω kann wegen

$$0 < \sum_j T_{ij}\Omega_j = (\hat{T}\Omega)_i = \|\hat{T}\|\Omega_i \implies \Omega_i > 0$$

verschwinden. Es folgt nun, dass $\tilde{\Omega}$ und Ω *linear abhängig* sein müssen. Um dies einzusehen setzen wir

$$\tilde{\Omega}_j = e^{i\varphi_j} |\tilde{\Omega}_j| \equiv e^{i\varphi_j} \Omega_j$$

in $(\tilde{\Omega}, \hat{T}\tilde{\Omega}) = (\Omega, \hat{T}\Omega)$ ein, und dies führt auf

$$\sum \tilde{\Omega}_j^* T_{jk} \tilde{\Omega}_k = \sum \Omega_j T_{jk} \Omega_k e^{i(\varphi_k - \varphi_j)} = \sum \Omega_j T_{jk} \Omega_k,$$

was $\varphi_k = \varphi_j \equiv \varphi$ nach sich zieht. Also ist $\tilde{\Omega} = e^{i\varphi}\Omega$. Nun folgt sofort der Satz von PERRON und FROBENIUS: es seien $\Omega^{(1)}$ und $\Omega^{(2)}$ zwei Eigenvektoren zum größten Eigenwert. Gemäß unseren Betrachtungen dürfen wir annehmen, dass alle Komponenten dieser Vektoren positive Zahlen sind. Dann gibt es immer ein $\alpha > 0$, so dass der Eigenvektor zum gleichen maximalen Eigenwert

$$\Omega^{(1)} - \alpha\Omega^{(2)}$$

positive und nicht-positive Komponenten hat. Dies widerspricht aber den gerade bewiesenen Eigenschaften eines derartigen Eigenvektors.

8.4 Nullstellen der Zustandssumme

Die Nullstellen von $Z_\Lambda(\beta, h)$ als Funktion der komplexen *Fugazität*

$$z = e^{2\beta h} \tag{8.64}$$

geben nach YANG und LEE Aufschluss über eventuelle Phasenübergänge [40]. Oberhalb der kritischen Temperatur T_c ist die Zustandssumme ungleich Null in der Umgebung der reellen Achse in der komplexen z -Ebene. Für $T \rightarrow T_{c+}$ nähern sich Nullstellen der reellen Achse und zeigen einen Phasenübergang an. Für das Ising-Modell mit $K = \beta J$

und Fugazität $z = \exp(2\beta h)$ ist die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(K, z) &= z^{-V/2} \sum_w \exp\left(K \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y\right) \underbrace{z^{(V+\sum s_x)/2}}_{z^k} \\ &= z^{-V/2} \sum_{k=0}^V a_k(K) z^k = z^{-V/2} P_\Lambda(z), \end{aligned} \quad (8.65)$$

bis auf den Faktor $z^{-V/2}$ ein Polynom vom Grad $V = |\Lambda|$ in der Fugazität. Damit ist für das endliche System die freie Energie eine analytische Funktion in $z > 0$ und entsprechend gibt es keinen Phasenübergang. Aber für $V \rightarrow \infty$ können Phasenübergänge auftreten und nach LEE und YANG müssen wir das Verhalten der Nullstellen für große Volumen untersuchen. Falls es ein Gebiet G in der komplexen Fugazitätsebene gibt, welches frei von Nullstellen ist und die reelle Achse einschließt, so sind dort die thermodynamischen Größen im Limes $V \rightarrow \infty$ analytisch. Phasenübergänge werden durch Schnitte der Nullstellenmenge mit \mathbb{R}^+ bestimmt. Schnittpunkte geben die Werte der Systemparameter (Temperatur, Magnetfeld,...) von Phasenübergängen an.

Das obige Polynom $P_\Lambda(z)$ hat V komplexe Nullstellen z_k . Da die Koeffizienten a_k in (8.65) reell sind, ist mit z_k auch \bar{z}_k eine Nullstelle. Da sie zudem positiv sind, liegen die z_k nicht auf der positiven reellen Achse. Die Menge der Spinkonfigurationen enthält mit $w = \{s_x | x \in \Lambda\}$ auch die gespiegelte Konfiguration $-w = \{-s_x | x \in \Lambda\}$. Wegen $H(w, h) = H(-w, -h)$ ändert die Zustandssumme sich nicht, wenn wir h durch $-h$ oder z durch $1/z$ ersetzen,

$$Z_\Lambda(K, z) = \sum_w e^{-\beta H(w, h)} \stackrel{w' = -w}{=} \sum_{w'} e^{-\beta H(w', -h)} = Z_\Lambda(K, 1/z). \quad (8.66)$$

Wir folgern aus dieser \mathbb{Z}_2 -Invarianz, dass mit z_k auch $1/z_k$ eine Nullstelle von P_Λ sein muss. Dies schränkt das Polynom P_Λ weiter ein,

$$P_\Lambda(z) = z^V P_\Lambda(1/z) \quad \text{oder} \quad a_k = a_{V-k} > 0, \quad (8.67)$$

Für das eindimensionale Ising-Modell können wir die Nullstellen der Zustandssumme (8.8) explizit angeben: Z_Λ verschwindet für

$$\lambda_+^N + \lambda_-^N = 0 \quad \text{oder} \quad \lambda_+ = e^{in\pi/N} \lambda_-, \quad n = 1, 3, \dots, 2N-1.$$

Mit (8.6) folgt daraus

$$i \sin\left(\frac{n\pi}{2N}\right) \cosh(\beta h_n) = \sqrt{e^{-4K} + \sinh^2(\beta h_n)} \cos\left(\frac{n\pi}{2N}\right)$$

und mit $\beta h_n = i\theta_n$ die Gleichung

$$\sin \frac{n\pi}{2N} \cos \theta_n = \sqrt{\sin^2 \theta_n - e^{-4K}} \cos \left(\frac{n\pi}{2N} \right).$$

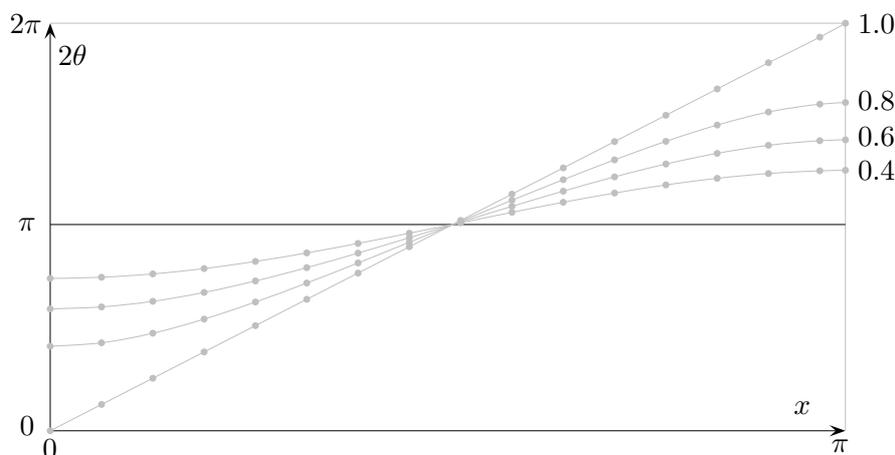
Quadrieren wir diese Gleichung und benutzen $\cos^2 = 1 - \sin^2$, so finden wir folgende Formeln für die halben Phasen θ_n der Yang-Lee Nullstellen $z_n = \exp(2i\theta_n)$,

$$\cos \theta_n(K) = \sqrt{1 - e^{-4K}} \cos \left(\frac{n\pi}{2N} \right), \quad n = 1, 3, \dots, 2N - 1. \quad (8.68)$$

Da der Wurzelfaktor im Intervall $[0, 1]$ liegt gibt es zu jedem n eine reelle Lösung θ_n und alle Nullstellen liegen auf dem Einheitskreis in der komplexen Fugazitätsebene. Für $T = 0$ ist die Wurzel 1 und die Nullstellen sind äquidistant. In der folgenden Abbildung haben wir Argumente der Nullstellen,

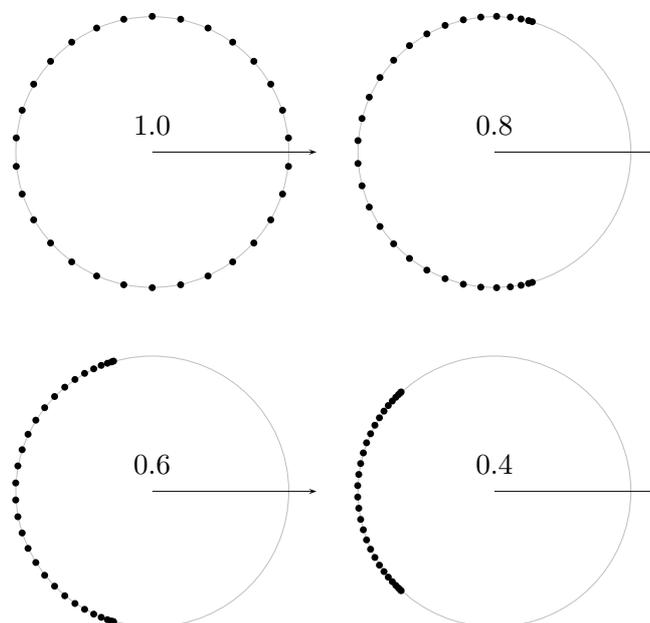
$$2\theta = 2 \arccos(\alpha \cos x) \quad \text{mit} \quad \alpha = \sqrt{1 - e^{-4K}},$$

für die Werte $\alpha = 1.0, 0.8, 0.6$ und 0.4 geplottet.



Für positive Temperaturen ist α kleiner 1 und entsprechend ist $\theta \in [\Delta, \pi - \Delta]$ mit $\Delta = \arccos \alpha > 0$. Der Abstand zwischen \mathbb{R}^+ und den Nullstellen ist mindestens $\sin \Delta > 0$ und es gibt keinen Phasenübergang für $T > 0$. Nur für $T = 0$ erwarten wir eine Singularität der freien Energiedichte bei $z = 1$, also bei verschwindendem Magnetfeld.

Die Lee-Yang-Nullstellen liegen alle auf dem Einheitskreis in der komplexen Fugazitätsebene. In der folgenden Abbildung sind die Nullstellen von $Z_\Lambda(z)$ für $|\Lambda| = 30$ und verschiedene Werte von α eingezeichnet.

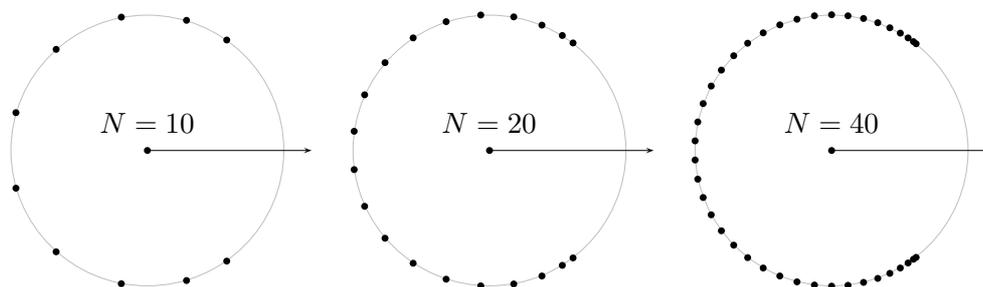


In der nächsten Abbildung sind die Nullstellen für

$$\alpha = \sqrt{1 - e^{-4K}} = 0.9,$$

also für eine positive Temperatur und für verschiedene Gittergrößen geplottet. Im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ häufen sich die Nullstellen von $Z_\Lambda(z)$ an der Lee-Yang-Kante bei

$$\Re z = \cos(2 \arccos 0.9) \quad \text{und} \quad \Im z = \sin(2 \arccos 0.9).$$



8.5 Dualitätsrelationen für Potts-kette

In diesem Abschnitt werden wir zeigen, dass die Zustandssummen der Potts-kette (8.34) eine Dualitätstransformation zulässt. Diese Eigenschaft bestimmt die Lage ihrer Nullstellen

im Raum der Kopplungen K . Dazu betrachten wir die Hilfsfunktion

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_\Lambda(\zeta, z) &= ((\zeta - 1)(z - 1))^{-N/2} Z_\Lambda(\zeta, z) \\ &= q' \left(\frac{\zeta - 1}{z - 1} \right)^{N/2} + \left(\frac{\lambda_+}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \right)^N + \left(\frac{\lambda_-}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \right)^N,\end{aligned}$$

die unter der Dualitätstransformation der Variablen $z = e^{2\beta h}$ und $\zeta = e^{\beta J}$ gemäß

$$(\zeta^* - 1)(z - 1) = q, \quad (z^* - 1)(\zeta - 1) = q \quad (8.69)$$

in sich übergeht,

$$\tilde{Z}_\Lambda(\zeta, z) = \tilde{Z}_\Lambda(\zeta^*, z^*). \quad (8.70)$$

Die Beziehungen (8.69) definieren zwei gebrochen lineare Möbius-Transformationen,

$$\zeta^* = \frac{z + q - 1}{z - 1} \quad \text{und} \quad z^* = \frac{\zeta + q - 1}{\zeta - 1}, \quad (8.71)$$

die verallgemeinerte Kreislinien in verallgemeinerte Kreislinien abbilden. Die Terme

$$\frac{\zeta - 1}{z - 1}, \quad \frac{\lambda_+}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \quad \text{und} \quad \frac{\lambda_-}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}},$$

aus deren Potenzen \tilde{Z}_Λ berechnet wird, sind einzeln invariant unter der Transformation (8.69). Für den ersten Term ist dies evident, für die beiden anderen Terme weniger.

Für die *Isingette* hat die Zustandssumme auf der rechten Seite in

$$Z_\Lambda(\zeta, z) = \left(\frac{(\zeta - 1)(z - 1)}{(\zeta^* - 1)(z^* - 1)} \right)^{N/2} Z_\Lambda(\zeta^*, z^*) \quad (8.72)$$

Nullstellen bei

$$\zeta^* = e^{2K^*} > 0 \quad \text{und} \quad z^* = e^{2i\theta_n(K^*)}, \quad (8.73)$$

wobei $\theta_n^*(K^*) \in \mathbb{R}$ in (8.68) gegeben ist. Mit der inversen Dualitätstransformation

$$\zeta \equiv e^{2K} = \frac{z^* + 1}{z^* - 1} = -i \cot \theta_n(K^*) \quad (8.74)$$

folgt, dass für festes $\beta h \in \mathbb{R}$ die Nullstellen von Zustandssumme $Z_\Lambda(\zeta, z)$ des Ising-Modells in der komplexen $\zeta = e^{2K}$ -Ebene auf der imaginären Achse liegen [41].

8.6 Programm: Simulation des 1d Ising Modells

Das folgende Programm `glgew1d.c` simuliert das eindimensionale Ising-Modell mit Energiefunktion

$$H(w) = -J \sum_{x=1}^N s_x s_{x+1} - h \sum_{x=1}^N s_x, \quad s_x = \pm 1. \quad (8.75)$$

Die ersten 500 Iterationen dienen zur Thermalisierung des Systems. Danach wird nur jede 20'ste Konfiguration ausgewertet um Korrelationen zwischen den Konfigurationen zu unterdrücken. Das Programm ist selbsterklärend. Es braucht die Datei `constantsising.h` auf Seite 145, in der die globalen Variablen und Konstanten N, M, MG, MA und die Kopplungskonstante J definiert sind sowie die header-datei `stdmcising.h` mit wichtigen Funktionen.

Für die Temperatur $T = 2.0$ werden die berechneten Werte für die Magnetisierung im File `iisingT=2.0` gespeichert. Dieser File befindet sich im Unterverzeichnis `.is1data` des Verzeichnisses, aus dem das Programm `glgew1d.c` aufgerufen wird.

glgew1d.c Braucht `constantsising.h` und `stdmcising.h`.

```

/* Programm ising1d.c */
/* Simulation des ferromagnetischen 1d Isingmodells */
/* Es wird die Magnetisierung fuer verschiedene Werte */
/* des Mangentfeldes berechnet und im File */
/* ./is1data/isingT=.. gespeichert. */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <string.h>
#include <time.h>
#include "constantsising.h"
#include "stdmcising.h"
int main(void)
{
    srand48(time(NULL));
    /* Temperatur einlesen */
    puts("Temperatur_(3_Zeichen)_=_");
    scanf("%3s",temp);
    beta=1/ atof(temp);
    strncat(ising1,temp,3);
    a=4*beta*J;
    fp=fopen(ising1,"w");
    fprintf(fp,"#_N=_%i_,_T=_%.3f\n",N,1/beta);
    fprintf(fp,"#_Magnetisierung_1-d_Ising\n");

```

```

/* Anfangskonfiguration */
for (i=0;i<N;i++)
    s[i]=-1; /* kalte Anfangskonfiguration */
/* if (rand()<1073741823) s[i]=1 else s[i]=-1 */
/* Ins Gleichgewicht bringen */
h=-5.0;b=2*beta*h;
/* Boltzmanngewichte berechnen */
boltzmann();
for (i=0;i<MG;i++) mcsweep(s);
/* Simulation und Berechnung */
/* Simulation fuer h von -5 bis 5 */
/* in Schritten von 0.5 */
for (i=-10;i<11;i++){
    h=0.5*i;b=2*beta*h;
    boltzmann(); pruef();
    ann=0;mittel1=0;
    for (j=0;j<M;j++){
        mcsweep(s);
        mittel1=mittel1+moments(1,s);
    };
    printf("angenommen_%.2f\n",(float)ann/(N*MA*M));
    fprintf(fp,"%4.1f_%%6.3f\n",h,2*mittel1/M);
};
fclose(fp);
return 0;
}

```

constantsising.h Diese Datei enthält Konstanten und globale Variablen.

```

/* Headerdatei constantsising.h */
/* Konstanten: N,M,MG,MA,J */
/* Variablen s[N], ising1[], etc. */
#define N 128 /* Anzahl Gitterpunkte */
#define M 10000 /* Anzahl Iterationen */
#define MG 500 /* bis zum Gleichgewicht */
#define MA 20 /* jede MA-te Konfiguration gemessen */
#define J 1.0
short nn, si, s[N], test[3][5];
unsigned int j,k;
double mittel1;
float a,b,vorz,beta,boltz[3][5],h;
int i,ann=0;
FILE *fp;
char temp[20],ising1[]="./is1data/isingT=";

```

stdmcising.h Die Datei enthält wichtige vom Hauptprogramm `glgew1d.c` aufgerufenen Funktionen. Es werden die in `constantsising.h` deklarierten Konstanten, Variablen und die Größen

$$a = 4\beta J \quad \text{und} \quad b = 2\beta h.$$

benötigt. Die Arrays `test` und `boltz` werden für die Monte-Carlo Iterationen gebraucht. Das erste Argument dieser Arrays ist der Wert des behandelten Spins s_x , plus 1, und das zweite Argument die Summe der Spins der nächsten Nachbarn, plus 2. Nimmt die Energie bei der Änderung von s_x ab, so ist `test = 0`, andernfalls 1. Im Array `boltz` werden die Boltzmanngewichte abgelegt. Damit spart man etwas Rechenzeit, da die Berechnung der Exponentialfunktion Zeit kostet. Die Kernroutine ist `mcsweep`. Hier finden sich *MA·MC*-Iterationen durch das Gitter. Es wird jeweils noch geprüft, wie oft ein Änderungsvorschlag angenommen wird.

```

/* Headerdatei stdmcising.h */
/* Funktionen pruef und boltz: */
/* Bereitstellung der Arrays test und boltzmann.*/
/* mcsweep: MA sweeps durch das Gitter */
/* moments: Berechnung des mittleren Spins */
void pruef(void)
{
    if (b>0){
        test [2][4]=1; test [2][2]=1; test [0][2]=0; test [0][4]=0;
        if (b>a) {test [0][0]=0; test [2][0]=1;}
        else {test [0][0]=1; test [2][0]=0;};
    }
    else{
        test [2][0]=0; test [0][2]=1; test [2][2]=0; test [0][0]=1;
        if (a+b>0) {test [2][4]=1; test [0][4]=0;}
        else {test [2][4]=0; test [0][4]=1;};};
}
void boltzmann(void)
{
    boltz [2][4]=exp(-a-b); boltz [2][2]=exp(-b);
    boltz [2][0]=exp(a-b); boltz [0][4]=exp(a+b);
    boltz [0][2]=exp(b); boltz [0][0]=exp(-a+b);
}
void mcsweep(short *s)
{
    int p,q;
    for (p=0;p<MA;p++){
        for (q=0;q<N;q++){
            nn=s [(q+1)%N]+s [(q+N-1)%N]+2;
            si=s [q]+1;

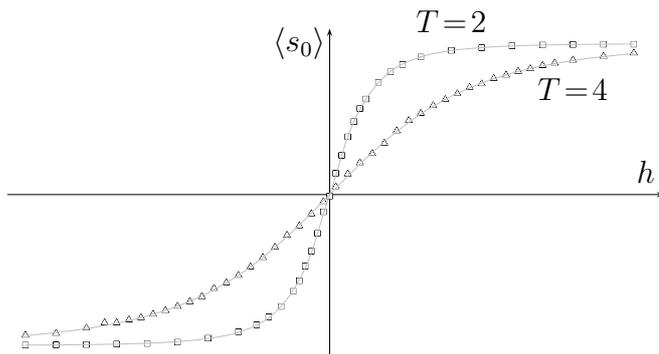
```

```

        if (test[si,nn]==0) {s[q]=-s[q]; ann=ann+1;}
        else
            if (drand48()<boltz[si][nn]){
                s[q]=-s[q]; ann=ann+1;};
    };
}
/* Berechnung der Momente */
double moments(short n,short *s)
{
    int p,sum=0;
    for (p=0;p<N;p++)
        sum=sum+s[p];
    /*sum=sum*pow(s[il],n);*/
    return (double)sum/N;
}

```

Mit diesem Code haben wir die Magnetisierung in Abhängigkeit von h für verschiedene Temperaturen bestimmt. In der folgenden Abbildung sind die Resultate unserer Monte-Carlo Simulationen für $N = 128$ eingezeichnet.



Die kleinen Quadrate sind die Werte für $T = 2$ und die Dreiecke gehören zu $T = 4$. Die Kurven gehören zur exakten Lösung im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$. Die Übereinstimmung zwischen den MC-Daten für $N = 128$ und der exakten Lösung für $N = \infty$ ist bemerkenswert.