Korrelationslänge ξ ist definiert über Abfall der Zweipunktfunktion

$$G(x-y) := < \phi_x \phi_y > - < \phi_x > < \phi_y >$$

Im thermodynamischen Limes für $T \neq T_c$:

$$G(x-y) \approx |x-y|^{2-d-\eta} \exp(-|x-y|/\xi)$$

(Ornstein-Zernicke Approximation)
Für die so definierte Korrelationslänge wird oft die Bezeichnung ξ_{exp} verwendet.

Häufig möchten wir etwas über den thermodynamischen Limes aus der Simulation lernen. In der Numerik können wir aber nur ein endliches Gitter betrachten.
Um Effekte eines Rands zu vermeiden, werden deshalb in der Regel periodische Randbedingungen betrachtet.
(In meinem Forschungsprojekt geht es um die physikalischen Effekte die durch einen Rand verursacht werden. Hierzu nimmt man dann natürlich andere, z.B. Dirichlet Randbedingungen)
Oft verschwindet die Abweichung von Erwartungswerten von Observabeln die für ein endliches Gitter (mit periodischen Randbedingungen) bestimmt sind, exponentiell schnell mit der Grösse des Gitters. Dies ist für das von uns betrachtete ϕ^4-Modell mit reellwertigem Feld der Fall. Eine gute Näherung des thermodynamischen Limes wird für $L \gg \xi$ erreicht. Dabei ist L die lineare Ausdehnung des Gitters. Bei der heute erreichbaren Genauigkeit, für das dreidimensionale Problem ist mit $L \gtrapprox 15\xi$ diese Abweichung in der Regel kleiner als statistische Fehler. Dies muss man jedoch prüfen, indem man für mehrere Werte von L simuliert.

Spontane Symmetriebrechung

Für ein verschwindendes äusseres Feld $h = 0$ gilt für alle endlichen Werte von κ:

$$\left\langle \frac{1}{V} \sum_x \phi_x \right\rangle = 0$$

In der statistischen Physik nimmt man in der Regel bei endlichem h den thermodynamischen Limes und dann $h \searrow 0$

In der Simulation ist das wenig praktisch. Man kann argumentieren, dass

$$m = \lim_{L \to \infty} \left\langle \frac{1}{V} \left| \sum_x \phi_x \right| \right\rangle$$

Aus der Not eine Tugend machen: Finite Size Scaling
(M.N. Barber, in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and J.L. Lebowitz, Vol 8 , 1983)

Beispiel: magnetische Suszeptibilität

$$\chi(L,\kappa) \simeq L^{2-\eta} f(L/\xi) \simeq L^{2-\eta} \tilde{f}(L^{1/\nu} t)$$

wobei $t = \frac{\kappa_c - \kappa}{\kappa_c}$. In letzten Schritt benutzen wir $\xi \propto t^{-\nu}$

Besonders interessant: Dimensionslose Grössen
Wichtiges Beispiel: Binder-Kumulante
(Nach Prof. Kurt Binder, Pionier auf diesem Feld)

$$U_4 = 1 - \frac{1}{3} \frac{< m^4 >}{< m^2 >^2}$$

(In meinen Arbeiten $U_4 =< m^4 > / < m^2 >^2$)
mit $m = \frac{1}{V} \sum_x \phi_x$

Für $L \gg \xi$ in der Hochtemperaturphase nimmt m eine Gaussverteilung um null an. Deshalb
$< m^4 > / < m^2 >^2 = 3$ und damit $U_4 = 0$

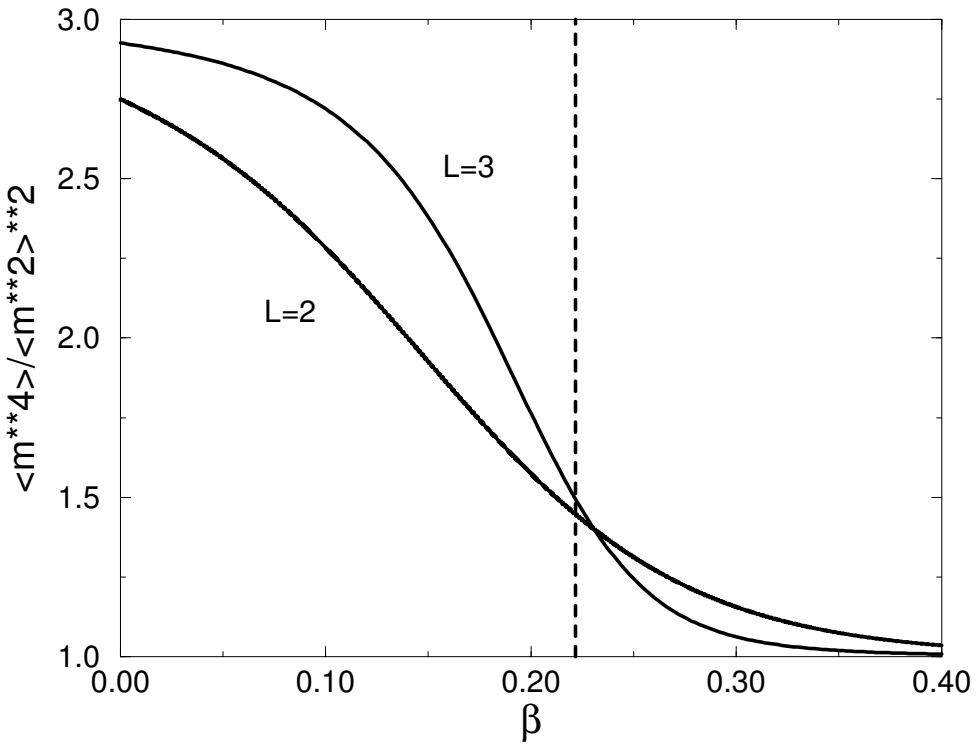
Auf der anderen Seite, in der Tieftemperaturphase fluktuiert $|m|$, für $L \gg \xi$, nur wenig um den Wert der spontanen Magnetisierung. Deshalb
$< m^4 > / < m^2 >^2 = 1$ und damit $U_4 = 2/3$

Allgemein für $\xi, L \gg 1$

$$U_4(L, \kappa) \simeq L^0 g(L/\xi) \simeq \tilde{g}(L^{1/\nu} t)$$

Für $t = 0$ hängt U_4 nicht von L ab. Plotted man U_4 für verschiedene Gittergrössen L als Funktion von κ, geben die Schnittpunkte einen Schätzwert von κ_c

$< m^4 > / < m^2 >^2$ für das Ising-modell mit $J = 1$ und $h = 0$ auf dem einfachkubischen Gitter der Grösse L^3 mit $L = 2$ und 3.



Ableitung von U_4 nach κ an der Stelle κ_c :

$$\left.\frac{\partial U_4(L,\kappa)}{\partial \kappa}\right|_{\kappa_c} \simeq \left.\frac{\partial \tilde{g}(L^{1/\nu} t)}{\partial \kappa}\right|_{\kappa_c} \propto L^{1/\nu}$$

Ähnlich verwendbar wie die Binderkummulante:

$$\frac{\xi_{2nd}}{L}$$

Definition der "second moment correlation length" ξ_{2nd} folgt unten.

Die Magnetisierung einer Scheibe ("time" slice) ist durch

$$M_{x_1} = \frac{1}{L_2 L_3} \sum_{x_2, x_3} \phi_{(x_1, x_2, x_3)} \quad .$$

gegeben. Wir definieren die Scheiben-Korrelationsfunktion:

$$G(r) = \langle M_{x_1} M_{x_1+r} \rangle - \langle M_{x_1} \rangle \langle M_{x_1+r} \rangle$$

Für $L_1 \to \infty$ gilt

$$G(r) = c_1 \exp(-r/\xi_1) + c_2 \exp(-r/\xi_2) + \ldots$$

Darauf basierend defineren wir eine effektive Korrelationslänge

$$\xi_{eff}(r) = \frac{1}{\ln(G(r+1)) - \ln(G(r))}$$

Falls L_1 doch nicht ganz so gross (periodische Randb.):

$$G(r) = const \quad [\exp(-r/\xi) + \exp(-(L_1 - r)/\xi)]$$

Hier nehmen wir an, dass der Term mit $\xi = \xi_1$ dominiert.

Second moment correlation length ξ_{2nd}:

$$\xi_{2nd}^2 = \frac{\mu_2}{2d\mu_0}$$

where

$$\mu_m = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{V} \sum_{x,y} (x-y)^m \langle s_x s_y \rangle_c$$

and

$$\langle s_x s_y \rangle_c = \langle s_x s_y \rangle - \langle s_x \rangle \langle s_y \rangle$$

Alternativ, also definition auf dem endlichen Gitter mit periodischen Randbedingungen besser geeignet:
The magnetic susceptibility χ and the second moment correlation length ξ_{2nd} are defined as

$$\chi \equiv \frac{1}{V} \left\langle \left(\sum_x s_x \right)^2 \right\rangle \quad , \tag{1}$$

where $V = L^3$ and

$$\xi_{2nd} \equiv \sqrt{\frac{\chi/F - 1}{4 \sin^2 \pi/L}} \quad , \tag{2}$$

where

$$F \equiv \frac{1}{V} \left\langle \left| \sum_x \exp\left(i \frac{2\pi x_k}{L} \right) s_x \right|^2 \right\rangle \tag{3}$$

is the Fourier transform of the correlation function at the lowest non-zero momentum. In our simulations, we have measured F for the three directions $k = 0, 1, 2$ and have averaged these three results.

Meine Arbeit zum ϕ^4 Modell auf dem einfachkubischen Gitter:

`http://arxiv.org/pdf/hep-lat/9902026v2.pdf`