Bose-Einstein-Kondensation und Translationssymmetriebrechung in periodischen eindimensionalen Diffusionsmodellen

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität
Bonn

vorgelegt von
Thomas Heinzel
aus
Ratingen

Bonn 1998

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Bonn

Referent:	Prof. Dr. V. Rittenberg
Korreferent:	Prof. Dr. R. Flume
Tag der Promotion:	

Inhalt

1. Einleitung

Die Untersuchung von Modellen, die aus einer großen Anzahl wechselwirkender Entitäten bestehen, ist für das Verständnis vieler Vorgänge in der Natur von großer Bedeutung. Kollektive Phänomene und damit Komplexität im weitesten Sinne, d.h. die Eigenschaften einer Gesamtheit lassen sich nicht direkt aus denen der Konstituenten ableiten, entstehen dabei nicht nur durch das Zusammenwirken unterschiedlicher Teilchen, die zu jeweils komplexen Interaktionen (auch mit langer Reichweite) fähig sind, sondern auch in Systemen, in denen gleichartige Teilchen nach einfachen Regeln lokal miteinander in Wechselwirkung treten.
In dieser Arbeit wurde erstmals ein Nichtgleichgewichtsmodell gefunden und umfasssend untersucht, das im Rahmen eines eindimensionalen Diffusionsprozesses, in dem Teilchen einfachen, lokalen Wechselwirkungen unterworfen sind, sowohl Brechung von Translationssymmetrie als auch eine Musterbildung aufweist, die Eigenschaften analog einer Bose-Einstein-Kondensation besitzt.

In der statistischen Mechanik erfolgt die Beschreibung eines Systems, das sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, mit Hilfe der Zustandssumme, die kombinatorisch aus der Anzahl der möglichen mikroskopischen Zustände des Systems für vorgegebene makroskopische Kenngrößen berechnet wird [1]. Die statistische Mechanik des Gleichgewichts ermöglicht vom Ansatz her keinerlei Erkenntnis über die Zeitentwicklung eines Systems.
In der Natur sind Gleichgewichtssysteme die Ausnahme. Die Analyse sehr vieler Phänomene erfordert daher die Einbeziehung von Nichtgleichgewichtseffekten. Dies gilt zum einen für die Untersuchung von Systemen, deren makroskopische Kenngrößen sich zeitlich ändern, zum anderen für die Untersuchung von Zuständen, die sich zwar zeitlich nicht ändern, denen aber kein thermodynamisches Gleichgewicht zugrunde liegt. Über die statistische Mechanik des Gleichgewichts hinaus, die keine Zeitentwicklung kennt, ist ein mathematischer Ansatz zur Beschreibung von Nichtgleichgewichtsmodellen erforderlich, bei dem die Dynamik eines Systems explizit formuliert wird.
Allgemein werden zeitlich unveränderliche Zustände eines Systems in dieser Arbeit als stationäre Zustände bezeichnet. Stationäre Zustände von Modellen, die sich nicht im Gleichgewicht befinden, sind im allgemeinen mit einem Transportphänomen verknüpft. In diesem Fall kann eine Größe definiert werden, die einen Fluß beispielsweise von Teilchen oder anderen Bestandteilen des Modells beschreibt und auch im stationären Zustand nicht verschwindet.
Wegen der hohen Komplexität und Unterschiedlichkeit von Nichtgleichgewichtsphänomenen gibt es zu ihrer Beschreibung keinen der statistischen Mechanik des Gleichgewichts entsprechenden theoretischen Rahmen. Ein möglicher Zugang besteht darin, Systeme zu untersuchen, die möglichst einfach sind, ohne dabei wesentliche Nichtgleichgewichtscharakteristika zu verlieren. Dazu werden Modelle mit wenigen verschiedenen Typen von Konstituenten gewählt, die einfachen Wechselwirkungsregeln unterworfen werden, so daß eine genaue, im Idealfall analytische Untersuchung möglich ist. Als analoges Beispiel für ein solches Vorgehen in der statistischen Mechanik des Gleichgewichts sei das Ising-Modell [2] genannt, das zur Untersuchung ferromagnetischer Phasenübergänge vorgeschlagen wurde. Vereinfachte Modelle zur Untersuchung von Nichtgleichgewichtsphänomenen erfahren zur Zeit großes Interesse, siehe z.B. [3]-[6].
Die Dynamik eines Vielteilchenmodells wird auch auf der Ebene der einzelnen Teilchen meist auf stochastische Weise definiert [3, 4]. Zum einen geschieht dies, da die Regeln, die das

Modell definieren, auf einer effektiven Dynamik beruhen, der fundamentale Wechselwirkungen zugrunde liegen, deren Auswirkungen nicht im einzelnen sondern nur stochastisch verfolgt werden können, zum anderen ist die genaue Abfolge von Zuständen, in denen das Modell sich befindet, meist nicht relevant, da nicht die Eigenschaften eines einzelnen bestimmten, sondern eines typischen Systems (bzw. der Mittelwert eines Ensembles von Systemen) untersucht werden sollen. Auch in der statistischen Gleichgewichtsmechanik werden Ensemble von Systemen probabilistisch durch die Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Konfigurationen beschrieben.

Für ein klassisches (d.h. nicht quantenmechanisches) System mit diskretem Konfigurationsraum kann eine stochastische Markov-Dynamik durch die Angabe einer Mastergleichung definiert werden [3]. Bei einem Markov-Prozeß hängen Übergangsraten zwischen Zuständen nur vom momentanen Zustand des Systems ab und nicht etwa von seiner "Vergangenheit", d.h. weiter zurückliegenden Zuständen. Dazu werden zunächst die (mikroskopischen) Konfigurationen β_j $(j = 0, 1, 2, \ldots)$ des Modells definiert. Geht man von einer kontinuierlichen Beschreibung der Zeitdimension aus, so erfüllen die zeitabhängigen Wahrscheinlichkeiten $P(\beta_k, t)$ für die einzelnen Zustände ein System linearer Differentialgleichungen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} P(\beta_k, t) = \sum_{j\,, j \neq k} R(\beta_k|\beta_j) P(\beta_j, t) - R(\beta_j|\beta_k) P(\beta_k, t) \tag{1.1}$$

Hierbei bezeichnet $R(\beta_k|\beta_j)$ die Wahrscheinlichkeitsrate für einen Übergang von Konfiguration β_j nach β_k. Der erste Term der rechten Seite entspricht den verschiedenen Möglichkeiten, zu der Konfiguration β_k zu gelangen, der zweite Term denjenigen, diese Konfiguration wieder zu verlassen.

Die in dieser Arbeit untersuchten Modelle lassen sich den sogenannten Reaktions-Diffusionsmodellen zurechnen, bei denen Teilchen sich auf einem diskreten Gitter bewegen und sich ineinander umwandeln können. Die Raten für die Übergänge werden lokal definiert. Die möglichen Konfigurationen der Modelle sind gerade die verschiedenen Möglichkeiten, das Gitter mit Teilchen zu besetzen. Die Ränder des Gitters können periodisch definiert werden oder Absorption und Injektion von Teilchen zulassen. Eine große Vielfalt solcher Modelle ist anhand numerischer und analytischer Methoden untersucht worden, siehe z.B. [5]-[9]. Bereits bei eindimensionalen Gittern lassen sich interessante Nichtgleichgewichtseffekte studieren. Zu diesen gehören randinduzierte Phasenübergänge (z.B. [10, 11]), die Entstehung von Schockfronten der Teilchendichte in verschiedenen Modellen, wobei die Form des Schocks universell sein kann (vgl. [12]-[21]), und Symmetriebrechung diskreter und kontinuierlicher Symmetrien: Spontane Brechung einer Z_2-Symmetrie wurde bei einem Dreizustandsdiffusionsmodell mit offenen Randbedingungen gefunden, in dem zwei Sorten von Teilchen sich in entgegengesetzte Richtungen bewegen [22]. In diesem Modell treten am Phasenübergang zwischen ungeordneter Phase und symmetriegebrochener Niedrigtemperaturphase makroskopische Schockfronten auf, die eine fluktuierende, räumliche Phasentrennung verwirklichen. Diese lassen sich ebenfalls bei einem asymmetrischen Diffusionsmodell mit zwei Zuständen je Gitterplatz beobachten [7, 11, 23]. Als weitere Nichtgleichgewichtseffekte können Metastabilität und spinodale Punkte beobachtet werden [21]. Ihrer genauen Untersuchung dient ein vereinfachtes Einteilchenmodell mit nichtlokalen Wechselwirkungen [24, 25]. In [26] wurde kürzlich ein periodisches Modell mit drei Teilchensorten vorgestellt, daß Translationssymmetriebrechung aufweist. All dies ist im Gegensatz zu eindimensionalen Gleichgewichtsmodellen anzusehen, bei denen keine spontane Symmetriebrechung auftreten kann, sofern die Wechselwirkung lokal ist.

Nur wenige Reaktions-Diffusionsmodelle ermöglichen eine exakte Bestimmung ihres stationären Zustands oder sogar darüber hinaus ihrer gesamten Zeitentwicklung. Ein Ansatz zur analytischen Bestimmung stationärer Zustände in einer Raumdimension ist die sogenannte Matrixproduktmethode (*matrix product approach*), bei der ein stationäres Wahrscheinlichkeitsmaß durch Elemente einer Algebra beschrieben wird, deren Generatoren quadratische Relationen erfüllen. Für periodische Systeme ergeben sich die Gewichte der stationären Wahrscheinlichkeitsverteilung als Spuren zugeordneter Elemente der Algebra.
In dieser Arbeit wird für den speziellen Fall von Diffusionsmodellen mit periodischen Randbedingungen (bei denen die Modelle translationsinvariant sind), Zweiteilchenaustauschprozessen und drei Zuständen je Gitterplatz untersucht, in welchen Fällen eine Beschreibung des stationären Zustands durch die Matrixproduktmethode möglich ist. Unter bestimmten Bedingungen an die Übergangsraten zwischen den Konfigurationen können Darstellungen quadratischer Algebren angegeben werden, die – zumindest im Prinzip – die analytische Berechnung aller stationären Eigenschaften des zugehörigen Modells erlauben. Diese Untersuchung bildet den ersten Schwerpunkt dieser Arbeit (Kapitel 2, 3 und 4). Die Ergebnisse sind bereits in [27] publiziert.
An vorhergehenden Arbeiten, die sich mit der Matrixproduktmethode für periodische Randbedingungen beschäftigen, sind zunächst die Untersuchungen [28, 29, 30] zu Quantenspinketten und [31] zu Nichtgleichgewichtsmodellen zu nennen. Diese verwenden quadratische Algebren ohne Terme, die linear in den Generatoren oder konstant sind. In den Arbeiten von Derrida, Janowsky, Lebowitz und Speer [16, 17], denen von Derrida, Evans, Mukamel und Mallick [18, 32, 33], von Lee, Popkov und Kim [19] und von Evans [34] wurden bereits quadratische Algebren zur Untersuchung von Diffusionmodellen mit drei Zuständen je Gitterplatz verwendet. Als physikalische Anwendung konnte dabei Schockbildung [17, 18, 19] und Bose-Einstein-Kondensation [34] in einem periodischen Diffusionssystem untersucht werden. Das Modell aus [34] wurde auch mit anderen Methoden untersucht [35]. Der allgemeine Fall der Matrixproduktmethode, wie er in Kapitel 3 hergeleitet werden wird, war jedoch bisher nicht bekannt.

Eine der gefundenen Algebren besitzt besondere Eigenschaften und führt zu der physikalisch motivierten Untersuchung eines speziellen Modells, das eine Vielzahl kollektiver Effekte zeigt. Es wird im folgenden als Kondensationsmodell bezeichnet werden. Die Untersuchung der physikalischen Eigenschaften dieses Modells bildet den zweiten Schwerpunkt dieser Arbeit (Kapitel 7 bis 10). Ein großer Teil der Ergebnisse ist in [36] und [37] veröffentlicht.
Das Kondensationsmodell ist räumlich diskret und zeitlich kontinuierlich definiert. In Kurzform läßt es sich folgendermaßen beschreiben: Auf einem eindimensionalen Ring von L Gitterpunkten befinden sich n_1 Teilchen einer ersten Sorte (positive Teilchen) und n_2 Teilchen einer zweiten Sorte ("negative" Teilchen); die übrigen Gitterplätze sind leer. Jeder Gitterplatz kann nur maximal einfach besetzt sein*, es gibt demnach drei mögliche Zustände für jeden Gitterpunkt. Die positiven Teilchen bewegen sich in eine (nach "rechts"), die negativen in die entgegengesetzte Richtung, und zwar springen Teilchen jeweils auf den in ihrer Bewegungsrichtung liegenden benachbarten Platz mit einer bestimmten

* Dies wird auch als Auschlußwechselwirkung bezeichnet

Wahrscheinlichkeitsrate λ, wenn dieser leer ist. Mit einer im allgemeinen anderen Rate q tauschen die Teilchen ihren Platz mit einem in ihrer Bewegungssrichtung benachbarten Teilchen der jeweils anderen Sorte. Als letzte Bewegungsmöglichkeit wird noch die Umkehrung dieses Vorgangs mit einer Rate γ zugelassen. Aus diesen vier einfachen, lokal für jedes Paar benachbarter Gitterplätze gültigen Bewegungsregeln

$$\begin{aligned}
(\cdots + 0 \cdots) &\mapsto (\cdots 0 + \cdots) &\quad \text{mit Rate} \quad \lambda \\
(\cdots 0 - \cdots) &\mapsto (\cdots - 0 \cdots) &\quad \text{mit Rate} \quad \lambda \\
(\cdots + - \cdots) &\mapsto (\cdots - + \cdots) &\quad \text{mit Rate} \quad q \\
(\cdots - + \cdots) &\mapsto (\cdots + - \cdots) &\quad \text{mit Rate} \quad \gamma
\end{aligned} \tag{1.2}$$

ergibt sich eine komplexe Interaktion: Man findet Phasenübergänge und es entstehen langreichweitig korrelierte Muster, die strukturierten Blocks von Teilchen entsprechen. Die Raten (2.16) sind symmetrisch unter Vertauschung der Teilchensorten (*charge conjugation* "C") und gleichzeitiger Umkehrung der Orientierung des Gitters (*parity conjugation* "P"). Neben dieser CP-Symmetrie ist das Modell translationsinvariant (periodisch) und erhält auch die Teilchenzahl der drei Teilchensorten.

Neben der Anwendung der algebraischen Methode wurde das Modell (1.2) mit umfangreichen Monte-Carlo-Simulationen untersucht. Mit diesen lassen sich, im Gegensatz zur Berechnung mit der Matrixproduktmethode, auch nichtstationäre Eigenschaften bestimmen, so daß Fragen nach Symmetriebrechung und Zeitskalen beantworten werden können.

Es wird gezeigt, daß das Kondensationsmodell drei verschiedene Phasen hat: In der ersten ist die Translationssymmetrie spontan gebrochen und es bilden sich feste Blocks von Teilchen, die nach Sorten getrennt sind (reine Phase). Die Blocks sind "unbeweglich" in dem Sinne, daß sie ihren Ort nur auf einer Zeitskala ändern, deren Länge exponentiell mit der Gitterlänge anwächst*. In einer zweiten Phase findet eine Form von Musterbildung statt. Diese verläuft in vielfacher Hinsicht analog zur Bose-Einstein-Kondensation eines idealen Bose-Gases in der statistischen Mechanik des Gleichgewichts. Für eine Dichte größer als ein bestimmter, von den Raten abhängiger kritischer Wert bildet sich ein Kondensat von Teilchen (gemischte Phase), das ohne leere Gitterplätze ist. Für endliche Gitterlänge besitzen die positiven Teilchen innerhalb des Kondensats ein von rechts nach links tangensförmig abfallendes Profil. Dasjenige der negativen Teilchen ist seitenverkehrt gleich. Das Kondensat ist zeitlich stabil, bewegt sich aber auf dem Gitter. Daneben existiert eine dritte, ungeordnete Phase, in der nur kurzreichweitige Korrelationen zwischen den Teilchen auftreten. Die zugehörige Korrelationslänge divergiert beim Übergang zur Kondensation. Dieser Phasenübergang läßt sich sowohl im kanonischen Ensemble (mit einer festen Anzahl von positiven und negativen Teilchen) als auch in einem großkanonischen Ensemble untersuchen, das durch eine bestimmte Wahl der Generatoren der quadratischen Algebra definiert wird. Am Phasenübergang divergiert dabei die Kompressibilität analog zur Bose-Einstein-Kondensation. Zur Unterscheidung der Phasen werden außerdem der Strom der Teilchen, allgemeine Zweipunktkorrelationsfunktionen, die Länge von Teilchenreihen, die nicht von Löchern unterbrochen sind, sowie die Verteilung der lokalen Dichte der neutralen Teilchen betrachtet.

Mit der Matrixproduktmethode werden in dieser Arbeit Rechnungen für Strom, Dichteverteilung in Abhängigkeit von Fugazität und Korrelationsfunktionen durchgeführt. Zum einen

* Für diese dynamische Definition von Symmetriebrechung vgl. [21, 22, 38]

sind dabei analytische Rechnungen möglich: Für einige Parameterwerte läßt sich eine endlichdimensionale Darstellung der quadratischen Algebra finden und damit z.B. der thermodynamische Limes des Stroms exakt berechnen. Zur Bestimmung des Grenzfalls großer q kann man eine dreidimensionale Darstellung verwenden. Zum anderen können mit Hilfe einer unendlichdimensionalen Darstellung, die für alle Parameterwerte existiert, Strom und allgemeine Zweipunktfunktionen für genügend große endliche Gitter numerisch so genau bestimmt werden, daß sich aus ihnen der Limes $L \to \infty$ extrapolieren läßt.
Der Zusammenhang zwischen kanonischem und großkanonischem Ensemble wird ebenfalls diskutiert. Die Rechnungen mit der Matrixproduktmethode erfolgen am einfachsten im großkanonischen Ensemble, d.h. verschiedene, durch die Teilchenzahlerhaltung des Modells getrennte Sektoren werden überlagert, wobei die relative Normierung der Sektoren durch die Darstellung der Algebra und durch zwei Fugazitäten gegeben wird, die die Dichten von positiven und negativen Teilchen festlegen. Diese Beschreibung versagt aber am Phasenübergang zu der Phase, in der ein Kondensat existiert. Das großkanonische Ensemble besitzt in dieser Phase keine wohldefinierte Dichte mehr. Dies hat z.B. eine Diskrepanz der im kanonischen und großkanonischen Ensemble berechneten Korrelationsfunktionen zur Folge. Die Beschreibung der gemischten Phase muß also im kanonischen Ensemble erfolgen*.
Für die gemischte Phase ergibt sich folgendes bemerkenswertes Resultat: Der Strom, gemittelt über positive und negative Teilchen ohne Berücksichtigung der jeweiligen Flußrichtung, ist durch

$$J = \frac{J_+ + J_-}{2} = \frac{q-1}{4} \tag{1.3}$$

gegeben*. Er ist unabhängig sowohl von λ als auch von der Dichte positiver wie negativer Teilchen. Das Kondensat läßt einen Fluß von Teilchen zu, der sich stets auf einen universellen Wert einstellt. Die Teilchen fließen durch das Kondensat hindurch. Die Universalität bezüglich der Teilchenzahl hängt mit der besonderen Eigenschaft des Systems zusammen, wonach der Teil des Gitters, in dem sich kein Kondensat gebildet hat (die "fluide Phase"), unabhängig von der Gesamtzahl von Teilchen stets die gleichen Eigenschaften besitzt. Daher ändert sich nur der Anteil der fluiden Phase am Gesamtsystem, aber nicht der Strom. Die Analogie zur Bose-Einstein-Kondensation ist offensichtlich. Einige Eigenschaften des Kondensats lassen sich näherungsweise auf Eigenschaften des partiell asymmetrischen Diffusionsmodells [39, 9] mit zwei Teilchensorten (ohne Löcher) zurückführen. Dies kann die Universalität des Stroms bezüglich des Parameters λ erklären, nicht jedoch das Auftreten eines Kondensats selbst.
Es zeigt sich, daß einige Eigenschaften des Modells gut mit Hilfe einer dynamischen *mean-field*-Theorie bestimmt werden können, bei der Korrelationen zwischen der Besetzung verschiedener Gitterplätze mit Teilchen unberücksichtigt bleiben. Dabei spielen räumlich inhomogene Lösungen der *mean-field*-Gleichungen eine Rolle, die für endliche Gitter numerisch berechnet oder für makroskopische Abstände analytisch bestimmt werden können. Dies gilt für den Strom und für die Dichteprofile in der gemischten Phase. Anhand dieses Modells läßt sich auch der Übergang von ungeordneter zu gemischter Phase bestimmen sowie in sehr guter Näherung die makroskopischen Zweipunktkorrelationen in der gemischten Phase. Homogene Lösungen der *mean-field*-Gleichungen führen für das Kondensationsmodell hingegen im allgemeinen zu falschen Ergebnissen.

* Dies gilt jedoch nicht für die Berechnung des Stroms.

* Hierbei ist die Zeitskala durch die Wahl $\gamma = 1$ festgelegt

Diese Arbeit gliedert sich in drei Teile. Der erste Teil, der die Kapitel 2 bis 4 umfaßt, beschäftigt sich mit der Matrixproduktmethode. Darin wird im zweiten Kapitel die mathematische Formulierung der zur Untersuchung kommenden Modelle eingeführt. Die Matrixproduktmethode und ihre Anwendung auf periodische Systeme wird erläutert. Das dritte Kapitel enthält eine allgemeine Untersuchung zur Matrixproduktmethode für periodische Diffusionssysteme mit drei Zuständen. Das vierte Kapitel beschäftigt sich mit der Anwendung der Ergebnisse auf das spezielle Kondensationsmodell, das durch Gleichung (1.2) definiert ist. Die unendlich- und endlichdimensionalen Darstellungen der zugehörigen quadratischen Algebra werden diskutiert, ebenso wie die Rolle von kanonischem und großkanonischem Ensemble. Eine Untersuchung des Limes $q \to \infty$ kann analytisch durchgeführt werden.
In einem zweiten Teil, bestehend aus den Kapiteln fünf und sechs, werden weitere Methoden zur Untersuchung des Kondensationsmodells diskutiert. Das fünfte Kapitel enthält eine Beschreibung der verwendeten Monte-Carlo-Simulationsalgorithmen, im sechsten wird die *mean-field*-Näherung der Mastergleichung vorgestellt.
Der dritte Teil beschreibt die Physik des Kondensationsmodells. Im siebten Kapitel werden die Ergebnisse für den Strom dargelegt, um einen Überblick über die Phasenstruktur des Modells zu gewinnen. Von besonderem Interesse ist die Universalität des Stroms in der gemischten Phase (Gleichung (1.3)). Im achten Kapitel wird die reine Phase untersucht, insbesondere die Korrelationsfunktionen. Es wird ein Ordnungsparameter definiert werden, dessen Zeitabhängigkeit beweist, daß in der reinen Phase die Translationssymmetrie spontan gebrochen ist. Die Bildung eines Kondensats in der gemischten Phase ist hingegen nicht mit einer Brechung der Translationsinvarianz verbunden. Das neunte Kapitel beschäftigt sich mit der gemischten Phase: Ein Modell zur Beschreibung dieser Phase, welches auf *mean-field*-Annahmen beruht, ergibt eine Näherung für den Ort des Phasenübergangs. Das Modell kann auch zur Beschreibung der inneren Struktur des Kondensats verwendet werden. Es liefert für große L Vorhersagen für makroskopische Korrelationsfunktionen, den Strom und den Anteil des Kondensats am Gesamtsystem. Das zehnte Kapitel diskutiert die Eigenschaften der ungeordneten Phase und den Kondensationsphasenübergang zur gemischten Phase. Weitere Eigenschaften des Kondensationsphänomens im Zusammenhang mit der großkanonischen Zustandssumme sind Thema des elften Kapitels: Die Dichte in Abhängigkeit von der Fugazität besitzt im thermodynamischen Limes eine unendliche Ableitung, und es läßt sich ein Symmetriebrechungsterm einführen, der die Bose-Einstein-Kondensation aufhebt (all dies in Analogie zur Zustandssumme bei einer Bose-Einstein-Kondensation im Gleichgewicht).
Das zwölfte und letzte Kapitel enthält eine Zusammenfassung der Arbeit und eine Diskussion der Ergebnisse.

2. Grundlagen der mathematischen Beschreibung

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der mathematischen Formulierung von eindimensionalen, räumlich diskreten Reaktions-Diffusionsmodellen. Im folgenden ersten Abschnitt wird allgemein erklärt, wie eine Klasse solcher Modelle mit einer endlichen Anzahl von Konfigurationen pro Gitterplatz und Wechselwirkungen zwischen direkt benachbarten Gitterplätzen beschrieben werden kann, vgl. z.B. [8, 9]. Speziell wird das Kondensationsmodell definiert, dessen Untersuchung den dritten Teil dieser Arbeit (Kapitel 7 bis 10) einnimmt. Im zweiten Abschnitt dieses Kapitels wird die allgemeine Formulierung der Matrixproduktmethode zur algebraischen Bestimmung stationärer Zustände für periodische Systeme dargelegt. Diese Methode wird im weiteren auf allgemeine Diffusionsmodelle (Kapitel 3) und insbesondere auf das Kondensationsmodell (Kapitel 4) angewendet werden.

2.1. Allgemeine Definition der Modelle — Zeitentwicklungsoperatoren

In einer Ringgeometrie seien L Gitterpunkte nebeneinander angeordnet. Es gebe N lokale Konfigurationen pro Gitterplatz: Für jeden Gitterplatz definiert man eine Zufallsvariable β_k, die die Werte $0, \ldots, N-1$ annehmen kann, wobei der Index $k = 1, \ldots, L$ den Gitterplatz bezeichnet. Die möglichen Konfigurationen des Modells werden durch die Zufallsvariable $(\beta) := (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_L)$ beschrieben. Man identifiziert die einzelnen Konfigurationen $\alpha = 0, \ldots, N-1$ eines Gitterplatzes mit N Sorten von Teilchen (bzw. mit $N-1$ verschiedenen Teilchensorten und für $\alpha = 0$ einem "leeren" Gitterplatz).

Es seien nur lokale Interaktionen, d.h. genauer direkte Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn zugelassen. In einem elementaren Prozeß kann sich bei einem Paar von benachbarten Gitterplätzen die Konfiguration auf einem oder beiden Plätzen ändern. Für jedes Paar $(k, k+1)$ von Gitterpunkten bezeichne die Rate $\Gamma^{\alpha_1,\alpha_2}_{\beta_1,\beta_2}$ mit $(\alpha_1, \alpha_2) \neq (\beta_1, \beta_2)$ die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für den lokalen Übergangsprozeß

$$(\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \alpha_1, \alpha_2, \ldots, \gamma_L) \mapsto (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \beta_1, \beta_2, \ldots, \gamma_L)\,. \tag{2.1}$$

Diese Raten sollen nicht von der Position des Interaktionspaares abhängen (homogenes Gitter). Das Gitter habe periodische Randbedingungen, d.h. in allen Ausdrücken ist Gitterplatz $L+1$ mit Gitterplatz 1 zu identifizieren.

Definiert man die "Rate"

$$\Gamma^{\gamma_1\gamma_2}_{\gamma_1\gamma_2} := - \sum_{\substack{\beta_k,\beta_{k+1}=0 \\ (\beta_k,\beta_k+1)\neq(\gamma_1\gamma_2)}}^{N-1} \Gamma^{\gamma_1\gamma_2}_{\beta_k\beta_k+1}\,, \tag{2.2}$$

so kann, wie in der Einleitung allgemein dargelegt, die Mastergleichung für die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P((\beta), t) \equiv P(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_L; t)$ als

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} P((\beta), t) = \sum_{k=1}^{L} \left(\sum_{\gamma_1,\gamma_2=0}^{N-1} \Gamma^{\gamma_1\gamma_2}_{\beta_k\beta_{k+1}} P(\beta_1, \ldots, \beta_{k-1}, \gamma_1, \gamma_2, \beta_{k+2}, \ldots, \beta_L; t) \right) \tag{2.3}$$

geschrieben werden. Aus Gleichung (2.2) folgt die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit $\sum_{(\beta)} P((\beta); t)$.

Zu jedem Gitterplatz $k = 1, \ldots, L$ definiert man nun einen endlichdimensionalen, reellen Vektorraum $V^{(k)}$ mit den orthonormalen Basisvektoren ${u_\alpha}^{(k)}$ ($\alpha = 0, 1, \ldots, N-1$). Dem gesamten Gitter wird der Vektorraum $V = V^{(1)} \otimes V^{(2)} \otimes \cdots \otimes V^{(L)}$ zugeordnet. Definiert man $N \times N$ Basismatrizen $E^{\alpha,\beta}$ durch

$$\left\{E^{\alpha,\beta}\right\}_{\alpha'\beta'} = \delta(\alpha - \alpha')\delta(\beta - \beta') \qquad \alpha, \beta, \alpha', \beta' = 0, \ldots, N-1\,, \tag{2.4}$$

so ergeben die Matrizen

$$ {E^{\alpha\beta}}_k = id_1 \otimes \cdots \otimes id_{k-1} \otimes E^{\alpha\beta} \otimes id_{k+1} \otimes \cdots \otimes id_L \qquad k = 1, \ldots, L \tag{2.5}$$

eine Basis für die linearen Endomorphismen von V. Hierbei bezeichnet id_k eine $N \times N$ Einheitsmatrix, die auf $V^{(k)}$ an Gitterplatz k angewendet wird, und $\delta(\alpha)$ das Kronecker-Deltasymbol. Mit Hilfe dieser Definitionen kann man die Mastergleichung auf eine Schrödingergleichung mit imaginärer Zeit abbilden. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P((\beta); t)$ wird dazu als Vektor aus V aufgefaßt

$$\begin{aligned} |P(t)> \; &:= \sum_{(\beta)} P(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_L; t)\; {u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes {u_{\beta_2}}^{(2)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)} \\ &= \begin{pmatrix} P(0,0,\ldots,0,0;t) \\ P(0,0,\ldots,0,1;t) \\ \vdots \\ P(N-1, N-1, \ldots, N-1, N-1; t) \end{pmatrix} . \end{aligned} \tag{2.6}$$

Damit erhält die Mastergleichung die Form

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |P(t)> = -H|P(t)> \tag{2.7}$$

mit einem lokalen Zeitentwicklungsoperator

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k=1}^{L} H_{k,k+1} \\ H_{k,k+1} &= -\sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma\delta} {E^{\gamma\alpha}}_k {E^{\delta\beta}}_{k+1} \,. \end{aligned} \tag{2.8}$$

$H_{k,k+1}$ wirkt auf die Gitterplätze k und $k+1$ (für diese Formulierung siehe auch [8, 9]). Der "Hamiltonoperator" H entspricht dem einer Quantenspinkette (für eine Diskussion dieses Zusammenhangs vgl. z.B. [8]). Er ist im allgemeinen weder hermitesch noch diagonalisierbar, ferner ist sein Spektrum nicht notwendig reell. Da die Einträge der H-Matrix jedoch reell sind, kommen komplexe Eigenwerte immer als komplex konjugierte Paare vor.

Es läßt sich zeigen (siehe z.B. [3]), daß die Realteile des Spektrums von H größer oder gleich null sind. Es existiert auch immer mindestens ein Eigenvektor zum Eigenwert null, wobei ein solcher Eigenvektor reell ist. Der Grundzustand des Hamiltonoperators hat also für alle Gittergrößen immer die Energie null. Dies ist auch anhand physikalischer Argumentation verständlich: Jedes räumlich endliche Reaktions-Diffusionssystem entwickelt sich von einem beliebigen Anfangszustand $|P(t=0)>$ aus zu einem Zustand $|P_0>$ hin, der stationär in der Zeit und demnach gerade ein Eigenvektor zum Eigenwert null ist:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |P_0> = -H|P_0> = 0 \tag{2.9}$$

Aufgrund der Wahrscheinlichkeitserhaltung verschwinden die Anteile der anderen Eigenvektoren am Anfangszustand mit $t \to \infty$, d.h. die Realteile der zugehörigen Eigenwerte sind positiv.
Die Form (2.7) erinnert an die Quantenmechanik. Es soll daher darauf hingewiesen sein, daß der Vektor $|P(t)>$ einer Wahrscheinlichkeitsverteilung entspricht und keiner Amplitude, wie es in der Quantentheorie der Fall wäre. Vielmehr ergeben sich die Eigenschaften eines Zustands $|P(t)>$ durch Mittelung über die Eigenschaften der einzelnen Konfigurationen (β) gewichtet mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P((\beta);t)$. Im oben eingeführten Formalismus bedeutet dies, daß sich die Eigenschaften der einzelnen Zustände durch lineare Operatoren $\hat{O}$ auf V beschreiben lassen. Jeder Konfiguration (β) wird ein reeller oder komplexer Wert $O((\beta))$ zugeordnet:

$$\hat{O}\, {u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes {u_{\beta_2}}^{(2)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)} = O((\beta))\, {u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes {u_{\beta_2}}^{(2)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)} \tag{2.10}$$

So ergibt sich der Erwartungswert $O := <\hat{O}>$ einer Observablen, die durch einen Operator $\hat{O}$ definiert ist, als

$$<\hat{O}>(t) = \sum_{(\beta)} P((\beta);t) O((\beta)) = <1|\hat{O}|P(t)> = <1|\hat{O}\exp(Ht)|P(t=0)> \ . \tag{2.11}$$

Hierbei ist $<v|w>$ das Standardskalarprodukt auf V und der Vektor $|1>$ ist definiert als

$$|1> := \sum_{\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_L=0}^{N-1} {u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes {u_{\beta_2}}^{(2)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} . \tag{2.12}$$

Aus der Wahrscheinlichkeitserhaltung (Gleichung (2.2)) folgt, daß die Spaltensummen von H null sind. Daher ist $|1>$ Linkseigenvektor zu H mit Eigenwert null. Dies beweist die Existenz einer stationären Lösung von Gleichung (2.7).
Alle stationären Eigenschaften des Systems erhält man aus den Grundzuständen des Hamiltonoperators. Eine Möglichkeit zur Bestimmung solcher Grundzustände ist die Matrixproduktmethode, die im folgenden Abschnitt erläutert werden wird. Dynamische Eigenschaften und Zeitskalen ergeben sich aus dem Anregungsspektrum und den zugehörigen Eigenvektoren.
Für homogene Hamiltonoperatoren H existiert immer mindestens ein translationsinvarianter stationärer Zustand, d.h. ein stationärer Zustand mit Impuls null: Definiert man den Verschiebungsoperator T durch

$$\begin{aligned} T|P> &= T \sum_{k_1,\ldots,k_L=0}^{N-1} P(\beta_{k_1},\beta_{k_2},\ldots,\beta_{k_L})\, u_{k_1} \otimes u_{k_2} \otimes \cdots \otimes u_{k_L} \\ &= \sum_{k_1,\ldots,k_L=0}^{N-1} P(\beta_{k_1},\beta_{k_2},\ldots,\beta_{k_L})\, u_{k_L} \otimes u_{k_1} \otimes \cdots \otimes u_{k_{L-1}} \ , \end{aligned} \tag{2.13}$$

so kann man den Projektionsoperator auf den Impuls k $(k = 0,\ldots,L-1)$ durch

$$P_k = \sum_{j=0}^{L-1} \mathrm{e}^{\frac{ikj}{2\pi}} T^j \tag{2.14}$$

ausdrücken. Die Existenz eines stationären Zustands mit Impulseigenwert null ergibt sich nun aus der Tatsache, daß zum einen für homogenes H

$$[H, T] = 0 \tag{2.15}$$

ist, und zum anderen stets ein Anfangszustand $|P(t=0)>$ mit Impuls null gewählt werden kann. Aus diesem erhält man durch die Zeitentwicklung auch einen stationären Zustand $|P_0>= \lim_{t\to\infty} \exp(-Ht)|P(t=0)>$ mit Impuls null.

Wenn der Konfigurationsraum durch Erhaltungssätze in getrennte Sektoren aufgespalten ist, zwischen denen durch die vorgegebenen Raten keine Übergänge erlaubt sind, dann besitzt jeder dieser Sektoren (mindestens) einen stationären Zustand. Enthält er überhaupt einen Zustand mit Impulseigenwert null, so auch einen stationären Zustand, der translationsinvariant ist. Ein Sektor kann aber auch mehrere stationäre Zustände besitzen, die nicht translationsinvariant zu sein brauchen.

Ein System bzw. ein Sektor, bei dem (bei endlicher Gitterlänge) für zwei beliebig vorgegebene Konfigurationen (β_1) und (β_2) nicht beide Übergänge $(\beta_1) \to (\beta') \to \ldots \to (\beta_2)$ und $(\beta_2) \to (\beta'') \to \ldots \to (\beta_1)$ unmöglich sind, nennt man ergodisch. Ein solches System bzw. ein solcher Sektor hat nur einen stationären Zustand [3]. Im periodischen Fall ist dieser also Impulseigenvektor zum Impuls null.

Die in dieser Arbeit untersuchten Modelle sind periodische Diffusionsmodelle. Dies bedeutet, daß von den Raten $\Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma\delta}$ nur diejenigen mit $\alpha = \delta \neq \beta = \gamma$ sowie die entsprechenden Diagonalterme $\Gamma^{\alpha\beta}_{\alpha\beta}$ von null verschieden sind. Für solche Modelle gilt sowohl Teilchenzahlerhaltung als auch Translationsinvarianz.

Es gelte die Bezeichnung $g_{\alpha\beta} := \Gamma^{\alpha\beta}_{\beta\alpha}$. Das Kondensationsmodell, auf das sich die Untersuchungen des dritten Teils dieser Arbeit (Kapitel 7 bis 10) richten, ist durch

$$g_{10} = g_{02} = \lambda\,, \qquad g_{01} = g_{20} = 0\,, \qquad g_{12} = q\,, \qquad g_{21} = \gamma \qquad (N=3) \tag{2.16}$$

definiert, vgl. (1.2). Teilchen zweier Sorten “1” und “2” hüpfen auf einem periodischen Gitter. Das Gitter enthält auch eine Anzahl “leerer” Gitterplätze (“0”-Teilchen). Die Raten sind CP-symmetrisch definiert. Entsprechend ihrer physikalischen Bedeutung werden die Teilchen der Sorten “1” und “2” auch als positiv (Index $+$) bzw. negativ (Index $-$) bezeichnet werden und die “0”-Teilchen als Löcher.

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann man für jedes Modell eine der nicht verschwindenden Raten gleich eins setzen, da die Einheit der Zeit frei gewählt werden kann. Für das Kondensationsmodell sei $\gamma = 1$ gewählt. Der Hamiltonoperator des Systems (2.16) ist nicht hermitesch und homogen.

2.2. Berechnung stationärer Zustände mit quadratischen Algebren

Zum besseren Verständnis und zur Herausstellung der Besonderheiten für periodische Systeme soll zunächst die Matrixproduktmethode für nichtperiodische Systeme beschrieben werden, die auch, wie zu sehen sein wird, konzeptuell einfacher ist.

Ähnlich wie im vorhergehenden Abschnitt geschildert, kann man auch Modelle mit offenen Randbedingungen betrachten. Für die zusätzlichen Prozesse, die nur an den Rändern stattfinden, führt man Übergangsraten ein, die auf den Gitterplätzen 1 (Rate L^{α}_{β}) bzw. L (Rate R^{α}_{β}) die Konfigurationen ändern können, vgl. [40]. In der Mastergleichung (2.3) entfällt dann der Term mit $k = L$ und man erhält stattdessen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P((\beta),t) = \sum_{\gamma=0}^{N-1} L_{\beta_1}^{\gamma} P(\gamma,\beta_2,\ldots,\beta_L;t) + \sum_{\gamma=0}^{N-1} R_{\beta_L}^{\gamma} P(\beta_1,\ldots,\beta_{L-1},\gamma;t) + \sum_{k=1}^{L-1} \sum_{\gamma_1,\gamma_2=0}^{L-1} \Gamma_{\beta_k\beta_{k+1}}^{\gamma_1\gamma_2} P(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_{k-1},\gamma_1,\gamma_2,\beta_{k+2},\ldots,\beta_L;t) \ , \tag{2.17}$$

wobei die Diagonalterme R_γ^γ und L_γ^γ durch die Wahrscheinlichkeitserhaltung festgelegt sind.
Mit der Matrixproduktmethode wurde z.B. das vollständig asymmetrische Exklusionsmodell behandelt [7, 11, 23], bei dem Teilchen einer Sorte nach rechts auf dem Gitter hüpfen, am linken Rand injiziert und am rechten Rand extrahiert werden, d.h. das Modell ist durch $N = 2$, $\Gamma_{01}^{10} = 1$, $L_1^0 \neq 0$, $R_0^1 \neq 0$ definiert (alle anderen nichtdiagonalen Raten sind null). Die Idee zur exakten Berechnung des stationären Zustands besteht darin, daß sich für dieses System die Gewichte der stationären Wahrscheinlichkeitsverteilung für ein Gitter der Länge L aus denen für ein Gitter der Länge $L-1$ berechnen lassen [11]. Diese Rekursionsrelationen lassen sich auch schreiben mit Hilfe einer quadratischen Algebra mit zwei Generatoren, für die eine spezielle Fockdarstellung angegeben werden kann [7]. Bereits dieses einfache Exklusionsmodell zeigt interessante physikalische Vielteilcheneffekte, insbesondere die Herausbildung dreier verschiedener Phasen abhängig von den Randbedingungen α und β sowie die Bildung von Schockfronten der lokalen Teilchendichte an einem der Phasenübergänge, vgl. [7, 11, 23] und darin enthaltene Literaturverweise.
Quadratische Algebren sind auch zur Beschreibung der stationären Zustände weiterer Modelle mit offenen Randbedingungen verwendet worden: In [9, 39] wird die Matrixproduktmethode auf das Exklusionsmodell ($N = 2$) mit partiell asymmetrischen Diffusionsraten angewendet. Die Diffusionskonstante dieses Modells wird in [41] exakt berechnet. Das Symmetriebrechungsmodell aus [22] mit $N = 3$ läßt sich ebenfalls teilweise, aber nicht im Bereich der spontanen CP-Symmetriebrechung mit der Matrixproduktmethode untersuchen. Eine allgemeine Untersuchung der Matrixproduktmethode für den Fall von c-Zahlen x_i, nichtperiodischen Randbedingungen und mehr als zwei Zuständen pro Gitterplatz findet sich in [40]. Die dort gefundenen quadratischen Algebren sind auch für diese Arbeit von Bedeutung, da einige von ihnen in abgewandelter Form auch für die Lösung periodischer Systeme verwendet werden können.
Die Matrixproduktmethode läßt sich auch auf Modelle anwenden, die durch eine diskrete Zeitentwicklung (*parallel updating*) an Stelle der kontinuierlichen Zeitenwicklung (2.3) (*random sequential updating*) definiert sind, siehe z.B. [42, 43, 44].
Hinrichsen, Sandow und Peschel untersuchen in [45] ein Modell mit $N = 2$, offenen Randbedingungen und – neben der Diffusion – Koagulations- und Dekoagulationsprozessen (d.h. die Raten Γ_{01}^{11}, Γ_{10}^{11}, Γ_{10}^{00}, Γ_{01}^{00} sind ebenfalls von null verschieden). Der stationäre Zustand dieses Modells kann unter bestimmten Bedingungen an die Raten durch eine Erweiterung der Matrixproduktmethode bestimmt werden, bei der zusätzliche Generatoren der quadratischen Algebra eingeführt werden. In [46] wird gezeigt, daß eine solche Erweiterung der Matrixproduktmethode keinen Ansatz im eigentlichen Sinne darstellt, sondern sich vielmehr jeder stationäre Zustand eines beliebigen Reaktions-Diffusionssystems mit nichtperiodischen Randbedingungen und einer endlichen Anzahl N von Zuständen je Gitterplatz durch

(unendlichdimensionale) Matrizen D_α und X_α ($\alpha = 0, \ldots, N-1$) beschreiben läßt, die

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha,\beta=0}^{N-1} \Gamma_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} D_\alpha D_\beta = D_\gamma X_\delta - X_\gamma D_\delta \\
&(X_\alpha + \sum_{\beta=0}^{N-1} R_\alpha^\beta D_\beta)|0\rangle = 0 \\
&\langle w|(X_\alpha - \sum_{\beta=0}^{N-1} L_\alpha^\beta D_\beta) = 0 \qquad\qquad \alpha,\gamma,\delta = 0,\ldots,N-1
\end{aligned} \tag{2.18}$$

erfüllen. Der stationäre Zustand ergibt sich dabei als

$$|P_0\rangle = \frac{\langle 0| \prod_{k=1}^{L} (\sum_{\beta_k=0}^{N-1} D_{\beta_k} u_{\beta_k}{}^{(k)})|0\rangle}{\langle w|(\sum_{k=0}^{N-1} D_i)^L|0\rangle}\,, \tag{2.19}$$

wobei das Produkt das Tensorprodukt der $u_j{}^{(k)}$ ist. Hierbei ist $|0\rangle$ ein kanonischer Basisvektor eines Hilfsvektorraums W, auf dem die Matrizen operieren, und $<w|$ ein Vektor aus dem Dualraum, der im allgemeinen von der Gitterlänge L abhängt. Die Matrizen R oder L können dabei auch null sein; man spricht dann von geschlossenen bzw. halboffenen Randbedingungen. Es gilt sogar die allgemeinere Aussage: Für einen beliebigen Hamiltonoperator mit begrenzter Anzahl von Zuständen pro Gitterplatz, lokaler Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn und Randtermen, die auf nur einen Gitterplatz wirken, läßt sich jeder Eigenzustand zum Eigenwert null als Matrixproduktzustand (2.18,2.19) schreiben [46].
Aus den Beziehungen (2.18) folgen in dem Fall, in dem die Matrizen X_i durch c-Zahlen x_i dargestellt werden, Rekursionsbeziehungen zwischen den stationären Zuständen verschiedener Gitterlängen.

Der periodische Fall der Matrixproduktmethode läßt sich folgendermaßen formulieren: Man betrachte eine komplexe Algebra mit den Generatoren D_α und X_α ($\alpha = 0, \ldots, N-1$) und den definierenden Relationen

$$\sum_{\alpha,\beta=0}^{N-1} \Gamma_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} D_\alpha D_\beta = D_\gamma X_\delta - X_\gamma D_\delta \qquad\qquad \gamma,\delta = 0,\ldots,N-1\,. \tag{2.20}$$

Ein Produkt von j Elementen der Algebra wird als Wort der Länge j bezeichnet werden. Für jede Wahl von Raten $\Gamma_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}$ existiert eine nichttriviale Algebra (2.20), d.h. es lassen sich von null verschiedene Objekte D_α und X_α finden, die diese Relationen erfüllen. Dies ergibt sich aus der Tatsache, daß dieselbe Algebra bei der Matrixproduktmethode für Systeme mit geschlossenen Rändern auftritt und dort aus der Existenz eines stationären Zustands eine Matrixdarstellung der D_α und X_α konstruiert werden kann [46].
Anstelle des Skalarprodukts in einem Hilfsraum W bei offenen Randbedingungen benötigt man für periodische Systeme zur Bestimmung der Gewichte des stationären Zustands eine Spuroperation. Kann man für alle L-fachen Produkte von Generatoren D_α der Algebra (2.20) eine nichttriviale Spur definieren, d.h. einen unter zyklischer Vertauschung invarianten multilinearen reellen Operator, der mit den Algebrarelationen verträglich ist, so erhält man einen stationären Zustand des durch die $\Gamma_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}$ gegebenen Reaktions-Diffusionsmodells der Länge

L durch

$$|P_0>= Z^{-1}\ \mathrm{Spur}(\prod_{k=1}^{L}(\sum_{\beta_k=0}^{N-1} D_{\beta_k} u_{\beta_k}^{(k)}))$$
$$Z = \mathrm{Spur}((\sum_{k=0}^{N-1} D_i)^L)\ . \tag{2.21}$$

Folgendermaßen sieht man, daß durch (2.21) tatsächlich ein stationärer Zustand gegeben ist:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|P_0>= Z^{-1}\sum_{i=1}^{L}\sum_{\beta_1,\ldots,\beta_L=0}^{N-1}\sum_{\gamma_1,\gamma_2=0}^{N-1}\Gamma_{\beta_i\beta_{i+1}}^{\gamma_1\gamma 2}\mathrm{Spur}(D_{\beta_1}u_{\beta_1}{}^{(1)}\otimes\ldots\otimes D_{\beta_{i-1}}u_{\beta_{i-1}}{}^{(i-1)}\\
\otimes D_{\gamma_1}u_{\gamma_1}{}^{(i)}\otimes D_{\gamma_2}u_{\gamma_2}{}^{(i+1)}\otimes D_{\beta_{i+2}}u_{\beta_{i+2}}{}^{(i+2)}\otimes\ldots\otimes D_{\beta_L}u_{\beta_L}{}^{(L)})\\
= Z^{-1}\sum_{i=1}^{L}\sum_{\beta_1,\ldots,\beta_L=0}^{N-1}\mathrm{Spur}(D_{\beta_1}u_{\beta_1}{}^{(1)}\otimes\ldots\otimes D_{\beta_{i-1}}u_{\beta_{i-1}}{}^{(i-1)}\\
\otimes(D_{\beta_i}u_{\beta_i}{}^{(i)}\otimes X_{\beta_{i+1}}u_{\beta_{i+1}}{}^{(i+1)} - X_{\beta_i}u_{\beta_i}{}^{(i)}\otimes D_{\beta_{i+1}}u_{\beta_{i+1}}{}^{(i+1)})\\
\otimes D_{\beta_{i+2}}u_{\beta_{i+2}}{}^{(i+2)}\otimes\ldots\otimes D_{\beta_L}u_{\beta_L}{}^{(L)})\\
= Z^{-1}\sum_{i=1}^{L}\sum_{\beta_1,\ldots,\beta_L=0}^{N-1}\mathrm{Spur}(D_{\beta_1}u_{\beta_1}{}^{(1)}\otimes\ldots\otimes D_{\beta_{i-1}}u_{\beta_{i-1}}{}^{(i-1)}\otimes D_{\beta_i}u_{\beta_i}{}^{(i)}\\
\otimes(X_{\beta_{i+1}}u_{\beta_{i+1}}{}^{(i+1)} - X_{\beta_{i+1}}u_{\beta_{i+1}}{}^{(i+1)})\otimes D_{\beta_{i+2}}u_{\beta_{i+2}}{}^{(i+2)}\otimes\ldots\otimes D_{\beta_L}u_{\beta_L}{}^{(L)}) = 0
\end{aligned}$$

Die letzte Umformung erhält man, indem man in den Termen mit dem Minus-Vorzeichen den Index i um eins verschiebt.

Die Existenz der Algebra (2.20) allein ist für die Berechnung des stationären Zustands nicht hinreichend. Insbesondere ermöglicht die Darstellung der Algebra, die sich aus dem korrespondierenden Problem mit geschlossenen Randbedingungen ergibt, im allgemeinen keine Berechnung des stationären Zustands des periodischen Systems, da sie für die Spur von Wörtern aus D_α-Matrizen null ergeben kann.

Es stellt sich also das Problem der Existenz einer Algebra (2.20) mit nichttrivialer Spur. In der Praxis sucht man nach Matrixdarstellungen, bei denen Produkte verschiedener Länge eine Spur besitzen. In diesem Zusammenhang ergibt sich eine bemerkenswerte Tatsache: Eindeutigkeit eines stationären Zustands (z.B. in einem Teilchenzahlsektor) bedingt, daß für alle Darstellungen der Algebra (2.20) die zugehörigen Spuren der D_α wegen (2.21) gleich sind bis auf einen Normierungsfaktor, der auch null oder unendlich sein mag.

Verwendet man an Stelle der Operatoren X_i komplexe Zahlen x_i, so ergeben sich Rekursionsrelationen für die Spuren von Wörtern verschiedener Länge. Zum einem müssen diese mit der Definition der Spur verträglich sein, zum anderen ermöglichen sie es im Prinzip, rekursiv die stationären Zustände für alle Gittergrößen zu bestimmen.

Durch die Matrixproduktmethode lassen sich nur translationsinvariante stationäre Zustände beschreiben, da die durch Gleichung (2.21) gegebenen Zustände immer den Impuls null besitzen, d.h. Eigenvektoren von P_0 zum Eigenwert eins und der anderen P_k zum Eigenwert null sind, vgl. Gleichung (2.14). Im Gegensatz zu Systemen mit offenen Randbedingungen, für die jeder stationäre Zustand als Matrixproduktzustand (Gleichungen (2.18) und (2.19)) beschrieben werden kann, ist für periodische Randbedingungen nicht bekannt, ob sich zumindest jeder translationsinvariante stationäre Zustand in einer solchen Weise (Gleichungen (2.20) und (2.21)) formulieren läßt. Die Verallgemeinerung auf allgemeine Hamiltonoperatoren mit nichtpositiven Raten, wie sie für offenene Randbedingungen möglich ist [46], gilt für periodische Systeme jedenfalls nicht [47].

3. Diffusionsmodelle mit periodischen Rändern und quadratische Algebren

Dieses Kapitel beschreibt allgemeine Untersuchungen zur Anwendbarkeit der Matrixproduktmethode (vgl. die Gleichungen (2.20) und (2.21)) auf periodische Diffusionsmodelle mit drei Zuständen je Gitterplatz. Es sollen also Modelle betrachtet werden, bei denen nur Übergangsraten der Form $\Gamma^{\alpha\beta}_{\beta\alpha} \equiv g_{\alpha\beta}$ und entsprechende Diagonalterme des Hamiltonoperators von null verschieden sind.
Da nur Diffusionsprozesse auftreten, bei denen die Teilchen lediglich ihre Plätze wechseln, ist die Anzahl n_α der Teilchen jeder einzelnen Sorte α zeitlich konstant. Dabei gilt natürlich

$$\sum_{\alpha=0}^{N-1} n_\alpha = L\ . \tag{3.1}$$

Wie zuvor ist N die Anzahl der möglichen Konfigurationen je Gitterplatz und L die Anzahl der Gitterplätze.
Wenn nicht anders vermerkt, wird im folgenden immer vorausgesetzt, daß zu zwei beliebigen verschiedenen Indizes α und β wenigstens eine der Raten $g_{\alpha\beta}$ und $g_{\beta\alpha}$ größer null ist. Mit dieser Bedingung sind die einzelnen Sektoren des Modells, die durch feste Teilchenzahlen n_α gegeben sind, ergodisch. Daraus folgt, daß in jedem Teilchenzahlsektor der stationäre Zustand eindeutig ist. Damit ist er auch translationsinvariant, so daß die Möglichkeit besteht, ihn mit Hilfe der Matrixproduktmethode (2.21) beschreiben zu können (vgl. die Diskussion im vorhergehenden Kapitel).
Es sollen hier nur solche Fälle betrachtet werden, in denen die Algebrageneratoren X_α durch reelle Zahlen x_α dargestellt werden können. Die Algebrarelationen (2.20) haben dann die einfachere Form

$$g_{\alpha\beta} D_\alpha D_\beta - g_{\beta\alpha} D_\beta D_\alpha = x_\beta D_\alpha - x_\alpha D_\beta \qquad \alpha, \beta = 0, 1, \ldots, N-1\ . \tag{3.2}$$

Diese $N(N-1)/2$ Relationen definieren eine komplexe Algebra für N c-Zahlen x_α und N Generatoren D_α. Die linke Seite von Gleichung (3.2) ist quadratisch, die rechte linear in den Generatoren D_α. Dies impliziert Rekursionsrelationen zwischen den Spuren von Wörtern verschiedener Länge, die Beziehungen zwischen den stationären Zuständen verschiedener Gitterlänge entsprechen.
Die Algebra (3.2) ist invariant unter den gleichzeitigen Transformationen

$$D_\alpha \mapsto d_\alpha D_\alpha, \quad x_\alpha \mapsto \mathrm{d}_\alpha x_\alpha \qquad \alpha = 0, 1, \ldots, N-1 \tag{3.3}$$

für beliebige α und reelle Zahlen d_α. Diese Symmetrie mit N freien Parametern ist mit der Teilchenzahlerhaltung verknüpft.
Läßt sich auf der Algebra (3.2) eine nichttriviale Spur definieren, so besitzt ein stationärer Zustand, der durch Gleichung (2.21) gegeben ist, die allgemeine Form

$$|P_0> = \sum_{n_0, \ldots, n_{N-1}} {d_0}^{n_0} {d_1}^{n_1} \cdots {d_{N-1}}^{n_{N-1}}\, |A_{n_0, n_1, \ldots, n_{N-1}}>\ , \tag{3.4}$$

wobei $|A_{n_0,n_1,\ldots,n_{N-1}}>$ den Grundzustand des Hamiltonoperators im Sektor mit Teilchenzahlen $n_0, \ldots, n_{N-1}$ bezeichnet und d_α die freien Parameter aus der Transformation (3.3). Es lassen sich auch Fälle finden, in denen eine bestimmte Darstellung der Algebra (3.2) nicht für alle Teilchenzahlsektoren benutzt werden kann, da die zugehörige Spur nur für bestimmte Wörter definiert ist (vgl. den Abschnitt 3.2.2).

Das allgemein zu lösende Problem kann auf folgende Weise formuliert werden: Gesucht sind Bedingungen an die Raten $g_{\alpha\beta}$, so daß die Gewichte $P_0((\beta)_L)$ der (translationsinvarianten) stationären Zustände Rekursionsrelationen bezüglich der Gitterlänge L erfüllen, die sich aus der Form (2.21) für die Gewichte der einzelnen Konfigurationen und aus den Relationen (3.2) ergeben. Die Gleichungen (2.21) bedeuten in diesem Sinne lediglich eine spezielle Bezeichnungsweise für die Gewichte, und die Rekursionsrelationen sind Bestimmungsgleichungen für eben diese Zahlen. Umgekehrt ergibt sich die Wohldefiniertheit der Algebra (3.2) und die Definition einer Spur auf dieser dann, wenn eine Lösung der Rekursionsbeziehungen für die Wahrscheinlichkeiten $P_0((\beta)_L)$ gefunden ist. Eine Darstellung der Algebra wird also im Prinzip nicht benötigt, aber oft zur Lösung der Rekursionsrelationen verwendet. Diese Überlegungen gelten natürlich analog auch für allgemeinere Raten $\Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma\delta}$.
Die zu dieser Fragestellung erzielten Ergebnisse finden sich in den folgenden Abschnitten dieses Kapitels. Nach einem Abschnitt über eindimensionale Darstellungen wird der Fall $N = 3$ näher betrachtet. Bei der Untersuchung der Rekursionsformeln, die sich aus (2.21) und (3.2) ergeben, wird dabei unterschieden zwischen den Fällen, bei denen keine, eine, zwei oder drei der Konstanten x_α ($\alpha = 0, 1, 2$) null ist bzw. sind. Die Untersuchung dieser Fälle erfolgt in den Abschnitten (3.2.1) bis (3.2.4).

3.1. Eindimensionale Darstellungen

Als einfachster Fall soll zunächst untersucht werden, für welche Raten $g_{\alpha\beta}$ sich die Generatoren D_α durch reelle Zahlen ersetzen lassen, d.h. wann die durch (3.2) definierte Algebra eine eindimensionale Darstellung zuläßt. Mit der Notation

$$a_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} - g_{\beta\alpha} \tag{3.5}$$

erhält man aus den Relationen (3.2) durch Einsetzen von Zahlen $d_\alpha = D_\alpha$

$$\frac{x_\alpha}{d_\alpha} - \frac{x_\beta}{d_\beta} = a_{\beta\alpha} \qquad \alpha, \beta = 0, 1, \ldots, N-1\,. \tag{3.6}$$

Wenn man einen stationären Zustand für ein System mit allen N Teilchensorten beschreiben möchte, darf keine der Zahlen d_α null sein. Aus den Gleichungen (3.6) folgen $(N-1)(N-2)/2$ Bedingungen an die Raten. Diese lassen sich als

$$a_{0\alpha} - a_{0\beta} = a_{\beta\alpha} \qquad \alpha, \beta = 1, 2, \ldots, N-1 \tag{3.7}$$

schreiben. Die Sonderstellung des Index null in diesen Gleichungen ist nur eine Frage der Notation. Sind diese Bedingungen erfüllt, so werden die Parameter x_α durch die Wahl der d_α festgelegt:

$$x_\alpha = d_\alpha(a_{0\alpha} + x_0/d_0) \qquad \alpha = 1, 2, \ldots, N-1 \tag{3.8}$$

Eine der Konstanten x_α kann frei gewählt werden; hier spielt diese Rolle x_0.
Eine eindimensionale Darstellung bedeutet, daß für jeden durch die Teilchenzahlerhaltung gegebenen Sektor (d.h. für jedes kanonische Ensemble) der stationäre Zustand durch eine Gleichverteilung der Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Konfigurationen gegeben ist. Für einen solchen Zustand ist die *mean-field*-Näherung exakt gültig (vgl. Kapitel 6). Für periodische Diffusionsprozesse mit $N = 2$ ist der stationäre Zustand immer vollständig symmetrisch, da die Bedingung (3.7) wegfällt.

3.2. Diffusionsmodelle mit drei Zuständen je Gitterplatz

3.2.1. Quadratische Algebren mit $x_\alpha \neq 0$

Für $N = 3$ und mit der Definition

$$D_\alpha = x_\alpha E_\alpha \qquad (\alpha = 0, 1, 2) \tag{3.9}$$

erhält man aus (3.2) die Algebra

$$\begin{aligned} &g_{01}\, E_0\, E_1 - g_{10}\, E_1\, E_0 = E_0 - E_1 \\ &g_{20}\, E_2\, E_0 - g_{02}\, E_0\, E_2 = E_2 - E_0 \\ &g_{12}\, E_1\, E_2 - g_{21}\, E_2\, E_1 = E_1 - E_2\,. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Zunächst betrachtet man das Rekusionssystem für Spuren von Wörtern der Längen eins, zwei und drei. Die Ausdrücke für $\mathrm{Spur}(E_0 E_1 E_2)$ und $\mathrm{Spur}(E_0 E_2 E_1)$ sind dabei nur dann konsistent, wenn

$$a_{01} - a_{02} = a_{21} \tag{3.11}$$

oder wenn

$$\begin{aligned} &a_{12}\,(g_{10}\, g_{20} - g_{01}\, g_{02})\ \mathrm{tr}(E_0) + \\ &a_{20}\,(g_{01}\, g_{21} - g_{10}\, g_{12})\ \mathrm{tr}(E_1) + \\ &a_{01}\,(g_{02}\, g_{12} - g_{20}\, g_{21})\ \mathrm{tr}(E_2) = 0 \end{aligned} \tag{3.12}$$

ist. Im Fall von Gleichung (3.11) läßt sich eine eindimensionale Darstellung der Algebra wählen, wie im vorhergehenden Abschnitt dargelegt (siehe (3.7)).
Unter der Voraussetzung (3.12) ist auch das System von Rekursionsgleichungen für Wörter bis zur Länge vier lösbar*. Für Wörter der Länge fünf und ohne spezielle Bedingungen an die Raten erhält man jedoch nur Lösungen, die auf allen nichttrivialen Sektoren verschwinden. Der Ansatz (3.12) ohne zusätzliche Bedingungen führt also nicht zum Ziel. Eine Suche nach möglichen Einschränkungen an die Raten führte ebenfalls zu keinem Erfolg. Aufgrund der Kompliziertheit der Rekursionsgleichungen bleibt jedoch ungeklärt, ob nicht doch solche Bedingungen existieren.
Eine andere Vorgehensweise besteht darin, nach endlichdimensionalen Darstellungen der Algebra (3.10) zu suchen. Dies wurde für die Dimensionen zwei, drei und vier versucht, aber wiederum wurde keine Möglichkeit gefunden, bei der die Matrixproduktmethode mit der Algebra (3.10) zur Berechnung des stationären Zustands eines Diffusionssystems benutzt werden kann.
Jedoch lassen sich, wenn man nur das algebraische Problem der Existenz einer quadratischen Algebra mit nichttrivialer Spur betrachtet, zweidimensionale Darstellungen finden. So kann die Algebra (3.10) unter der Bedingung

$$g_{10} g_{01} = g_{20} g_{02}\,, \quad g_{12} = -g_{21} = \frac{g_{20}(g_{02} - g_{01})}{g_{01} + g_{20}} \tag{3.13}$$

* Dies impliziert, daß der Grundzustand für Gitter bis zur Länge vier mit der Matrixproduktmethode bestimmt werden kann.

durch die Generatoren

$$
\begin{aligned}
E_0 &= \frac{1}{g_{20} - g_{01}} \begin{pmatrix} g_{01}/g_{02} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
E_1 &= \frac{1}{g_{01} - g_{02}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -({g_{01}}^2 + {g_{20}}^2)/\lambda {g_{20}}^2 & g_{01}/g_{20} \end{pmatrix} \\
E_2 &= \frac{1}{g_{02} - g_{01}} \begin{pmatrix} g_{01}/g_{20} & \lambda \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.14}
$$

dargestellt werden, wobei λ ein freier Parameter ist. Die Bedingung (3.13) ist jedoch nicht mit der Positivität der Raten $g_{\alpha\beta}$ vereinbar.

3.2.2. Quadratische Algebren mit einem $x_\alpha = 0$

Betrachtet man den Fall, in dem eine der Konstanten x_α null ist, so lassen sich Diffusionsprozesse identifizieren, für die ein Matrixproduktansatz möglich ist. Die vollständige in diesem Abschnitt vorgestellte Lösung war bisher nicht bekannt.

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit sei $x_0 = 0$. Definiert man

$$D_1 = x_1 \, E_1 \, , \qquad D_2 = x_2 \, E_2 \, , \tag{3.15}$$

so erhält man aus (3.2) die Algebra

$$
\begin{aligned}
&g_{01} \, D_0 \, E_1 - g_{10} \, E_1 \, D_0 = D_0 \\
&g_{02} \, D_0 \, E_2 - g_{20} \, E_2 \, D_0 = D_0 \\
&g_{12} \, E_1 \, E_2 - g_{21} \, E_2 \, E_1 = E_1 - E_2 \, .
\end{aligned}
\tag{3.16}
$$

Diese Algebra hat eine spezielle Struktur dahingehend, daß alle unabhängigen Wörter aus den Generatoren D_0, E_1 und E_2 in der Form

$$D_0^k E \qquad k \in \{0, 1, 2, 3, \ldots\} \tag{3.17}$$

geschrieben werden können, wobei E ein nur aus E_1 und E_2 zusammengesetztes Wort bezeichnet. In dem Rekursionssystem für die Spuren sind diejenigen Spuren von Wörtern entkoppelt, die eine unterschiedliche Anzahl von D_0-Generatoren enthalten. Wenn man nur den Sektor ohne D_0 betrachtet, kann daher in den Gleichungen (3.16) $D_0 = 0$ gesetzt werden, und man erhält eine Algebra mit den zwei Generatoren E_1 und E_2. Für diesen Fall wurde bereits im ersten Abschnitt dieses Kapitels gezeigt, daß eine eindimensionale Darstellung existiert. Daher ist für diesen Sektor der stationäre Zustand vollständig symmetrisch. Die Abkopplung des Sektors ohne D_0 wird im folgenden wichtig werden, da noch zu beschreibende Matrixdarstellungen von (3.16) für diesen Sektor keine endliche Spur besitzen (siehe Gleichungen (3.41) und (3.51)).

Analog zu Abschnitt 3.2.1 wurden zunächst Wörter bis zur Länge drei untersucht. Aus den Ausdrücken für Spur$(D_0 E_1 E_2)$ und Spur$(D_0 E_2 E_1)$ ergibt sich eine Konsistenzbedingung. Es folgt notwendig für die Existenz einer Algebra (3.16) mit nichttrivialer Spur entweder erneut die Bedingung (3.11) (gemäß der eine eindimensionale Darstellung existiert) oder aber

$$g_{01} \, g_{02} = g_{10} \, g_{20} \quad . \tag{3.18}$$

Zunächst soll der Fall

$$g_{01}\ ,\ g_{20}\ ,\ g_{10}\ ,\ g_{02} \neq 0 \tag{3.19}$$

von (3.18) betrachtet werden. Aus der Untersuchung der Konsistenzbedingungen für Wörter bis zur Länge vier erhält man nun zwei neue Bedingungen, die zusammen mit (3.18)

$$g_{10} = g_{02}\ , \qquad g_{01} = g_{20}\ , \qquad g_{21} - g_{12} = g_{01} - g_{10} \tag{3.20}$$

ergeben. Im weiteren wird angenommen, daß die Asymmetrien $a_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} - g_{\beta\alpha}$ von null verschieden sind (im anderen Fall können wir eine eindimensionale Darstellung verwenden). Es zeigt sich, daß die notwendige Bedingung (3.20), die sich darstellungsunabhängig aus den Rekursionsbeziehungen ergeben hat, auch hinreichend ist, da für diesen Fall eine Darstellung der Algebra gefunden werden kann.
Definiert man

$$f_{01} := \frac{g_{01}}{g_{10}} = \frac{g_{20}}{g_{02}}\ , \qquad f_{21} := \frac{g_{21}}{g_{12}} \tag{3.21}$$

und

$$G_1 := (g_{01} - g_{10})E_1\ , \qquad G_2 := (g_{10} - g_{01})E_2\ , \tag{3.22}$$

so ergibt sich unter Berücksichtigung von (3.20) die quadratische Algebra

$$\begin{aligned} f_{01}\, D_0\, G_1 - G_1\, D_0 &= (f_{01} - 1)\, D_0 \\ f_{01}\, G_2\, D_0 - D_0\, G_2 &= (f_{01} - 1)\, D_0 \\ f_{21}\, G_2\, G_1 - G_1\, G_2 &= (f_{21} - 1)\, (G_1 + G_2)\ . \end{aligned} \tag{3.23}$$

Diese Algebra ist invariant unter den gleichzeitigen Transformationen

$$D_0 \mapsto D_0\ ,\ G_1 \mapsto G_2\ ,\ G_2 \mapsto G_1\ ,\ f_{01} \mapsto \frac{1}{f_{01}}\ ,\ f_{21} \mapsto \frac{1}{f_{21}} \tag{3.24}$$

und es gilt

$$\begin{aligned} {f_{01}}^n\, {D_0}^n\, G_1 - G_1\, {D_0}^n &= ({f_{21}}^n - 1)\, {D_0}^n \\ {f_{01}}^n\, G_2\, {D_0}^n - {D_0}^n\, G_2 &= ({f_{21}}^n - 1)\, {D_0}^n\ . \end{aligned} \tag{3.25}$$

Die Gleichungen (3.24) und (3.25) erlauben es, die Berechnung von Spuren zu vereinfachen. Aus den Arbeiten [9] und [40] ist bekannt, daß die Algebra

$$\begin{aligned} &\mathcal{A}\,\mathcal{B} - r\,\mathcal{B}\,\mathcal{A} = 1 \\ &\mathcal{A}\,\mathcal{N} - q\,\mathcal{N}\,\mathcal{A} = \mathcal{A} \\ &\mathcal{N}\,\mathcal{B} - q\,\mathcal{B}\,\mathcal{N} = \mathcal{B} \end{aligned} \tag{3.26}$$

für beliebige Parameter r und q eine Fockdarstellung besitzt. Diese Algebra enthält einen mit r-deformierten harmonischen Oszillator (Generatoren $\mathcal{A}$ und $\mathcal{B}$) sowie einen q-deformierten Zahloperator $\mathcal{N}$. Die Darstellung ist gegeben durch

$$\mathcal{A}\,|0\rangle = \langle 0|\,\mathcal{B} = 0\ , \qquad \mathcal{B} = \mathcal{A}^T\ , \tag{3.27}$$

wobei $|0>$ ein kanonischer Einheitsvektor ist sowie $\mathcal{A}^T$ die transponierte Matrix zu $\mathcal{A}$. Die Matrizen haben die Form

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & g_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & g_2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & g_3 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} , \quad \mathcal{N} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & p_2 & 0 & \\ 0 & 0 & p_3 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} , \tag{3.28}$$

wobei die Konstanten durch

$$g_n{}^2 = \{n\}_r , \qquad p_n = \{n-1\}_q , \qquad \{n\}_\lambda = \frac{\lambda^n - 1}{\lambda - 1} \tag{3.29}$$

definiert sind. Eine Darstellung der Algebra (3.23) ergibt sich hieraus durch

$$\begin{aligned} &G_1 = 1 - \sqrt{f_{21} - 1}\,\mathcal{A} , \qquad G_2 = 1 + \sqrt{f_{21} - 1}\,\mathcal{B} , \qquad r = f_{21} \\ &D_0 = d_0(1 + (f_{01} - 1)\,\mathcal{N}) , \qquad q = f_{01} . \end{aligned} \tag{3.30}$$

Dies kann auch folgendermaßen geschrieben werden:

$$G_1 = 1 + \mathcal{F}_1 , \qquad G_2 = 1 + \mathcal{F}_2 , \qquad D_0 = d_0\,\mathcal{I}(f_{01}) \tag{3.31}$$

Die Matrizen $\mathcal{F}_1$, $\mathcal{F}_2$ und $\mathcal{I}(q)$ haben dabei die einfache Form

$$\begin{aligned} &\mathcal{F}_1 = \begin{pmatrix} 0 & -f_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -f_2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & -f_3 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} , \qquad \mathcal{F}_2 = -\,\mathcal{F}_1^T \\ &\mathcal{I}(q) = \begin{pmatrix} e_0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & e_1 & 0 & \\ 0 & 0 & e_2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.32}$$

mit

$$f_k{}^2 = f_{21}^k - 1, \qquad e_k = f_{01}^k .$$

Für praktische Rechnungen ergeben sich die nützlichen Relationen

$$\begin{aligned} &f_{01}\,\mathcal{I}(f_{01})\,\mathcal{F}_1 = \mathcal{F}_1\,\mathcal{I}(f_{01}) \\ &f_{01}\,\mathcal{F}_2\,\mathcal{I}(f_{01}) = \mathcal{I}(f_{01})\,\mathcal{F}_2 \end{aligned} \tag{3.33}$$

und

$$\begin{aligned} &\mathcal{F}_1\,\mathcal{F}_2 = 1 - f_{21}\,\mathcal{I}(f_{21}) \\ &\mathcal{F}_2\,\mathcal{F}_1 = 1 - \mathcal{I}(f_{21}) . \end{aligned} \tag{3.34}$$

Für beliebige Konstanten λ_1 und λ_2 gilt ferner

$$\mathcal{I}(\lambda_1)\,\mathcal{I}(\lambda_2) = \mathcal{I}(\lambda_1\lambda_2) . \tag{3.35}$$

Die Spur von $\mathcal{I}(\lambda)$ für eine beliebige Zahl $\lambda < 1$ ist

$$\mathrm{tr}\ \mathcal{I}(\lambda) = \frac{1}{1-\lambda} . \tag{3.36}$$

Diese Beziehungen können zur Berechnung des stationären Zustands verwendet werden, ohne daß explizit die unendlichdimensionale Darstellung (3.32) benutzt werden muß. Die Vorgehensweise ist dabei folgendermaßen: Aus Gleichung (3.32) ersieht man, daß alle Spuren von Produkten, die nicht eine gleiche Anzahl von $\mathcal{F}_1$ und $\mathcal{F}_2$ enthalten, null sind. Zu berechnen bleiben also nur die Spuren der übrigen Produkte. Man benutzt die Kommutatorrelationen (3.33), um die $\mathcal{I}(\lambda)$ in diesen direkt hintereinander zu bringen, und anschließend gemäß (3.35) zu berechnen. Die Produkte von $\mathcal{F}_1$ und $\mathcal{F}_2$ können nach (3.34) aufgelöst und anschließend mit dem Rest, wiederum gemäß (3.35), zusammengezogen werden.
Zusammenfassend erhält man folgende

- **Darstellung der Algebra (3.2) für $g_{10} = g_{02} \neq 0$, $g_{01} = g_{20} \neq 0$ und $g_{21} - g_{12} = g_{01} - g_{10} = g_{20} - g_{02} \neq 0$:**

  Für die Bedingung (3.20) läßt sich die Matrixproduktmethode durchführen; eine Darstellung der Algebra (3.2) ist durch

$$D_1 = \frac{x_1}{g_{01} - g_{10}} \begin{pmatrix} 1 & -f_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & -f_2 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & -f_3 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$D_2 = \frac{x_2}{g_{10} - g_{01}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ f_1 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & f_2 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & f_3 & 1 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$D_0 = d_0 \begin{pmatrix} e_0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & e_1 & 0 & \\ 0 & 0 & e_2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} , \qquad x_0 = 0 \tag{3.37}$$

  gegeben mit ${f_k}^2 = (g_{01}/g_{10})^2 - 1$ und $e_k = (g_{21}/g_{12})^k$. Diese Darstellung ist unendlichdimensional; für $g_{12} = g_{21}$ kann sie auf eine eindimensionale Darstellung reduziert werden, vgl. Abschnitt 3.1. Es soll darauf hingewiesen sein, daß die drei freien Parameter der Algebra (vgl. (3.3)) in der soeben vorgestellten Darstellung durch d_0 (vgl. (3.31)), $d_1 = x_1$ und $d_2 = x_2$ (vgl. (3.15)) gegeben sind.

Ausgehend von der allgemeinen Bedingung (3.18) soll nun der verbleibende Fall

$$g_{01} = g_{20} = 0 \tag{3.38}$$

untersucht werden, für den sich ebenfalls eine Darstellung der quadratischen Algebra angeben läßt. Die Raten g_{10} und g_{02} seien dabei von null verschieden. Eine Diskussion des Falls mit $g_{01} = g_{10} = 0$, bei dem es also zwei Teilchensorten gibt, die keine Diffusion untereinander zulassen, findet sich in Abschnitt (3.2.3).
Zunächst definiert man

$$G_1 := -g_{10}E_1 \ , \qquad G_2 := g_{02}E_2 \tag{3.39}$$

und erhält aus (3.16) die Algebra

$$\begin{aligned} &G_1\, D_0 = D_0 \\ &D_0\, G_2 = D_0 \\ &g_{12}\, G_1\, G_2 - g_{21}\, G_2\, G_1 = g_{02}\, G_1 + g_{10}\, G_2 \ . \end{aligned} \tag{3.40}$$

Ähnlich wie im vorhergehenden Fall führt man Matrizen $\mathcal{F}_\alpha$ ein:

$$G_1 = 1 + \mathcal{F}_1, \qquad G_2 = 1 + \mathcal{F}_2, \qquad D_0 = d_0\, \mathcal{F}_0 \tag{3.41}$$

Wiederum lassen sich Ergebnisse verwenden, die in [40, 9] für Modelle mit nichtperiodischen Randbedingungen gefunden wurden. Die Algebra

$$\begin{aligned} &\mathcal{A}\, \mathcal{I}(0) = 0 \\ &\mathcal{I}(0)\, \mathcal{B} = 0 \\ &\xi(\mathcal{A}\, \mathcal{B} - r\, \mathcal{B}\, \mathcal{A}) = \mathcal{A} + \mathcal{B} + 1 \end{aligned} \tag{3.42}$$

hat die Fockdarstellung

$$\mathcal{B} = \mathcal{A}^T\ , \qquad \mathcal{A} = \begin{pmatrix} a_1 & k_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & k_2 & 0 & \\ 0 & 0 & a_3 & k_3 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{A}\, |0\rangle = \langle 0|\, \mathcal{B} = 0 \tag{3.43}$$

mit den Bezeichnungen

$$a_n = \frac{1}{\xi}\, \frac{r^{n-1} - 1}{r - 1}, \qquad {k_n}^2 = \frac{1}{\xi^2}\, \frac{r^n - 1}{r - 1} \left(\xi + \frac{r^{n-1} - 1}{r - 1} \right) \tag{3.44}$$

sowie $\mathcal{I}$ wie in (3.32). Hieraus gewinnt man mit der Identifizierung

$$r = \frac{g_{21}}{g_{12}}, \qquad \xi = \frac{(g_{10} + g_{02} + g_{21} - g_{12})(g_{21} - g_{12})}{(g_{10} + g_{21} - g_{12})(g_{02} + g_{21} - g_{12})} \tag{3.45}$$

eine Darstellung der F_α aus Gleichung (3.41)

$$\begin{aligned} &\mathcal{F}_0 = \mathcal{I}(0) \\ &\mathcal{F}_1 = \frac{g_{10}}{g_{21} - g_{12}} (\mathcal{I}(r) + \mathcal{V} - 1) \\ &\mathcal{F}_2 = \frac{g_{02}}{g_{21} - g_{12}} (\mathcal{I}(r) + \tilde{\mathcal{V}} - 1)\ , \end{aligned} \tag{3.46}$$

wobei $\mathcal{I}$ wiederum wie in (3.32) definiert ist und

$$\mathcal{V} := \begin{pmatrix} 0 & s_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & s_2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & s_3 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \qquad \tilde{\mathcal{V}} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \tilde{s}_1 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \tilde{s}_2 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \tilde{s}_3 & 0 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \tag{3.47}$$

mit

$$s_k \tilde{s}_k = (r^k - 1)(\xi + r^{k-1} - 1)\ \ . \tag{3.48}$$

Die Produkte $\mathcal{V}\tilde{\mathcal{V}}$ und $\mathcal{V}\tilde{\mathcal{V}}$ können durch $\mathcal{I}(r)$ und $\mathcal{I}(r^2)$ ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{V}}\mathcal{V} &= (1-\xi)\mathcal{I}(0) + r(\xi - 1 - r^{-1})\mathcal{I}(r) + r\mathcal{I}(r^2) \\ r\,\tilde{\mathcal{V}}\mathcal{V} &= r(1-\xi)\mathcal{I}(0) + r(\xi - 1 - r^{-1})\mathcal{I}(r) + \mathcal{I}(r^2) \end{aligned} \tag{3.49}$$

Außerdem gilt

$$r\,\mathcal{I}(r)\,\mathcal{V} = \mathcal{V}\,\mathcal{I}(r)\;, \qquad \tilde{\mathcal{I}}(r)\,\mathcal{V} = r\,\tilde{\mathcal{V}}\,\mathcal{I}(r)\;, \tag{3.50}$$

so daß, ähnlich wie im vorhergehenden Fall, die Berechnung der Spuren von Wörtern der Algebra auf ein kombinatorisches Problem zurückgeführt werden kann, vgl. die Diskussion nach Gleichung (3.36).
Man erhält also folgende

- **Darstellung der Algebra (3.2) für $g_{01} = g_{20} = 0$, $g_{10} \neq 0$ und $g_{02} \neq 0$:**

  Die den stationären Zustand beschreibenden Matrizen D_α (3.2) besitzen unter der Bedingung (3.38) die Darstellung:

$$D_1 = -\,x_1 \begin{pmatrix} a_1 & t_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & t_2 & 0 & \\ 0 & 0 & a_3 & t_3 & \\ 0 & 0 & 0 & a_4 & \ddots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}, \qquad D_2 = x_2 \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ f_1 & a_2 & 0 & 0 & \\ 0 & f_2 & a_3 & 0 & \\ 0 & 0 & f_3 & a_4 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$D_0 = d_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}, \qquad x_0 = 0 \tag{3.51}$$

  mit

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{g_{21}-g_{12}}\left(-1 + \frac{g_{10}+g_{21}-g_{12}}{g_{10}}\left(\frac{g_{21}}{g_{12}}\right)^{k-1}\right) \\ t_k\,f_k &= \frac{(g_{10}+g_{21}-g_{12})(g_{02}+g_{21}-g_{12})}{(g_{21}-g_{12})^2\,g_{10}g_{02}}\,s_n\tilde{s}_n\;, \end{aligned}$$

  vgl. (3.45) und (3.48). In dieser Darstellung sind die drei freien Parameter der Algebra wiederum durch d_0, x_1 und x_2 gegeben.
  Die Matrizen (3.51) sind im allgemeinen unendlichdimensional. Für spezielle Parameter, die so gewählt sind, daß für ein k das Produkt $t_k\,f_k$ verschwindet, existieren jedoch endlichdimensionale Darstellungen. Dies wird im folgenden für Rechnungen zum Kondensationsmodell verwendet werden.
  Es soll darauf hingewiesen sein, daß das Ergebnis (3.51), obwohl für $g_{21} = g_{12}$, $g_{10} = g_{12} - g_{21}$ oder $g_{02} = g_{12} - g_{21}$ nicht alle Zwischenschritte der Rechnung definiert sind, im Grenzübergang $g_{21} \to g_{12}$, $g_{10} \to g_{12} - g_{21}$ bzw. $g_{02} \to g_{12} - g_{21}$ auf eine auch für diese Fälle gültige Darstellung führt.

Für $g_{10} = g_{12} - g_{21}{}^\star$ erhält man aus (3.51) die Form

$$
\begin{aligned}
D_1 &= -\frac{x_1}{g_{10}}\left(1 + \frac{g_{02}}{g_{02} - g_{10}}\mathcal{A}\right) \\
D_2 &= \frac{x_2}{g_{02}}\left(1 + \frac{g_{02} - g_{10}}{g_{12}}\mathcal{B}\right) \\
D_0 &= d_0\,\mathcal{I}(0)
\end{aligned}
\tag{3.52}
$$

mit den Matrizen

$$
\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & f_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & f_2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & f_3 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ t_1 & b_2 & 0 & 0 & \\ 0 & t_2 & b_3 & 0 & \\ 0 & 0 & t_3 & b_4 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}
\tag{3.53}
$$

und

$$
b_n = \frac{r^{n-1} - 1}{r - 1}, \qquad t_n f_n = \frac{r^n - 1}{r - 1}, \qquad r = \frac{g_{21}}{g_{12}}\,.
$$

Diese Matrizen erfüllen die Fockdarstellung

$$
\mathcal{A}\,\mathcal{I}(0) = 0\,, \quad \mathcal{I}(0)\,\mathcal{B} = 0\,, \quad \mathcal{A}\,\mathcal{B} - r\,\mathcal{B}\,\mathcal{A} = \mathcal{A} + 1\,, \quad \mathcal{A}\,|0\rangle = \langle 0|\,\mathcal{B} = 0
\tag{3.54}
$$

und werden auch in [40] verwendet.

Damit wurden für $x_0 = 0$ und $x_1, x_2 \neq 0$ alle möglichen Fälle gefunden, in denen eine quadratische Algebra der Form (3.2) existiert. Es konnte jeweils eine Darstellung der Algebra angegeben werden*. Darstellungen für Systeme mit offenen Randbedingungen können, wenn sie nur eine Spur haben, auch für solche mit periodischen verwendet werden. Bei offenen Rändern müssen zusätzliche Bedingungen erfüllt sein, die die Ränder mit den übrigen Prozessen verknüpfen. Die Existenz einer Spur stellt jedoch eine starke Forderung, vgl. die Diskussion in Kapitel 2.
Für die beiden Spezialfälle $g_{21} = 0$ von (3.20) und von (3.38) wird eine Darstellung der D_α bereits von Derrida, Janowsky, Lebowitz und Speer angegeben [17].
In [16, 17] wird ein vollständig asymmetrisches Exklusionsmodell näher untersucht, in das ein einzelnes zusätzliches "2"-Teilchen eingebracht wird, welches die Bewegung der anderen "1"-Teilchen nicht beeinflußt. Dies entspricht den Raten $g_{10} = g_{12} = g_{20} = 1$, $g_{01} = g_{21} = g_{02} = 0$. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der "1"-Teilchen ist gleichförmig ohne Korrelationen, vgl. Abschnitt 4.1; die Raten für das "2"-Teilchen sind hingegen so gewählt, daß es eine Position auf dem Gitter anstrebt, die einen möglichst großen Gradienten der Dichte von "1"-Teilchen aufweist. Solche Gradienten entstehen durch lokale Fluktuationen. Im Bezugssystem des "2"-Teilchens ergibt sich so ein Schockprofil. Des weiteren wird in [17] das System mit zwei "2"-Teilchen untersucht. Die Rechnungen erfolgen darstellungsunabhängig direkt durch die Rekursionsrelationen, die sich aus der Matrixproduktformulierung ergeben.

* Der Fall $g_{02} = g_{12} - g_{21}$ verläuft analog.

* Durch Permutation der Indizes $1, 2, 3$ gewinnt man natürlich aus den angegebenen Fällen weitere Möglichkeiten.

Berechnungen zu Strom, Dichteprofil und Korrelationsfunktionen für ein Modell mit voneinander unabhängigen Diffusionsraten g_{10}, g_{20} und g_{12} sowie $g_{01} = g_{21} = g_{02} = 0$ finden sich in [18, 19]. Die Raten der Arbeit [19] erhält man hieraus durch Vertauschung der Indizes 0 und 2. Diese Arbeiten betrachten ein System mit einem "2"-Teilchen. Es handelt sich also jeweils um ein asymmetrisches Diffusionsmodell, das mit einer (beweglichen) Inhomogenität versehen wird, so daß sich Staus von Teilchen bilden. Zwischen den Bereichen mit niedriger und hoher Teilchendichte auf den beiden Seiten der Inhomogenität ergibt sich ein Schockprofil. Dieselbe Form des Schocks findet sich auch für Modelle mit offenen Randbedingungen [20]. Auch in [18, 19] wurden direkt die Rekursionsbeziehungen für die Spuren verschieden langer Wörter verwendet.

3.2.3. Quadratische Algebren mit zwei $x_\alpha = 0$

Es sei $x_2 \neq 0$ gewählt. Mit $E_2 := \frac{1}{x_2} D_2$ wird die quadratische Algebra (3.2) zu

$$\begin{aligned} g_{02}\, D_0\, E_2 - g_{20}\, E_2\, D_0 &= D_0 \\ g_{12}\, D_1\, E_2 - g_{21}\, E_2\, D_1 &= D_1 \\ g_{01}\, D_0\, D_1 - g_{10}\, D_1\, D_0 &= 0\ . \end{aligned} \tag{3.55}$$

Wendet man die Spuroperation auf die dritte Algebrarelation an, so folgt sofort $g_{01} = g_{10}$. Betrachtet man die Spuren weiterer Wörter bis zur Länge vier, so ergibt sich als Konsistenzbedingung entweder die Bedingung für eine eindimensionale Darstellung oder

$$g_{01} = g_{10} = 0\ . \tag{3.56}$$

In diesem Fall ist die Symmetrie des Modell viel größer als die der Teilchenzahlerhaltung allein. Es gibt keine Regeln, die Wörter mit verschiedenen Sequenzen von D_0- und D_1-Generatoren verbinden, denn verschiedene Sequenzen von "0"- und "1"-Teilchen gehören zu verschiedenen Sektoren. Es ist bekannt, daß in diesem Fall die Algebra existiert und eine Spur besitzt; eine Darstellung kann angegeben werden [48]. Eine darstellungsunabhängige Rechnung, die diese Algebra benutzt, findet sich in der Arbeit zur Bose-Einstein-Kondensierung von Evans [34], vgl. die Schlußbemerkungen dieser Arbeit.

3.2.4. Quadratische Algebren mit $x_\alpha = 0$

Wendet man die Spuroperation auf die Algebrarelationen (3.2) an, so folgt sofort

$$g_{10} = g_{01}, \qquad g_{02} = g_{20}, \qquad g_{12} = g_{21}\ . \tag{3.57}$$

Unter diesen Voraussetzungen an die Raten ist der stationäre Zustand symmetrisch, und es kann eine eindimensionale Darstellung der quadratische Algebra gewählt werden, vgl. Abschnitt 3.1.

4. Die Matrixproduktmethode für das Kondensationsmodell

Im vorangehenden Kapitel wurde gezeigt, daß der Matrixproduktansatz (Gleichungen (3.2) und (2.21)) für die Raten des Kondensationsmodells (2.16) durchgeführt werden kann. Für die Raten

$$g_{10} = g_{02} = \lambda \;, \qquad g_{12} = q =: \frac{1}{r} \;, \qquad g_{21} = 1 \tag{4.1}$$

existiert die quadratische Algebra

$$\begin{aligned} &G_1 G_2 = r(G_2 G_1 + \lambda(G_1 + G_2)) \\ &G_1 G_0 = G_0 \\ &G_0 G_2 = G_0 \end{aligned} \tag{4.2}$$

zusammen mit einer nichttrivialen Spur. Die Beziehung zwischen den D_α (Algebra (3.2)) und den G_α ist durch

$$D_0 = d_0 G_0 \;, \qquad D_1 = -\frac{x_1}{\lambda} G_1 \;, \qquad D_2 = \frac{x_2}{\lambda} G_2 \tag{4.3}$$

gegeben. Die Parameter d_0, x_1 und x_2 bleiben als Konsequenz der Teilchenzahlerhaltung frei. Im weiteren wird die quadratische Algebra in der einfachen Form (4.2) zugrunde gelegt; in (2.21) lassen sich die Generatoren D_α durch G_α ersetzen. Gemäß den Gleichungen (3.51), (4.1) und (4.3) erhält man mit den Bezeichnungen

$$G_1 = \mathcal{A} + \mathcal{U} \;, \qquad G_2 = \mathcal{A} + \mathcal{V} \tag{4.4}$$

die Darstellung

$$G_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} , \qquad \mathcal{A} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & a_3 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & a_4 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & t_2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & t_3 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} , \qquad \mathcal{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ f_1 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & f_2 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & f_3 & 0 & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} , \tag{4.5}$$

wobei

$$\begin{aligned} &a_k = r\left((\lambda+1)\{k-1\}_r - \{k-2\}_r\right) \\ &f_k\, t_k = \{k\}_r \left((2\lambda+1)r - 1 + (r(\lambda+1)-1)^2 \{k-1\}_r\right) \end{aligned} \tag{4.6}$$

mit der Bezeichnung

$$\{k\}_r \equiv \frac{r^k - 1}{r - 1} \;. \tag{4.7}$$

Diese Darstellung existiert für alle Parameter λ und r.
Wie bereits im letzten Kapitel erwähnt, sind die Darstellungen (4.5) nicht notwendig unendlichdimensional. Für gegebene Werte von λ und r ist man naturgemäß an einer Darstellung mit möglichst kleiner Dimension interessiert. Man kann n-dimensionale Darstellungen aus (4.5) gewinnen, wenn

$$f_n\, t_n = 0 \tag{4.8}$$

ist. Aus den Gleichungen (4.6) und (4.8) erhält man als Bedingung für die Existenz einer n-dimensionalen Darstellung

$$\lambda = \frac{1-r}{r(1+r^{\frac{1-n}{2}})}\ . \tag{4.9}$$

Die Matrixelemente haben unter dieser Bedingung die Form

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1+r^{k-\frac{1+n}{2}}}{1+r^{\frac{1-n}{2}}} \\ f_k\, t_k &= \frac{(1-r^k)(1-r^{k-n})}{\left(1+r^{\frac{1-n}{2}}\right)^2}\ . \end{aligned} \tag{4.10}$$

Man erhält speziell eine eindimensionale Darstellung (und demnach für jeden Teilchenzahlsektor einen vollständig symmetrischen stationären Zustand), wenn

$$q = 2\lambda + 1\ . \tag{4.11}$$

Eine zweidimensionale Darstellung ist für

$$q = (1+\lambda)^2 \tag{4.12}$$

möglich. In diesem Fall ergibt sich

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{r} \end{pmatrix}\ , \quad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} 0 & 1-\sqrt{r} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\ , \quad \mathcal{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{r}-1 & 0 \end{pmatrix}\ . \tag{4.13}$$

Eine zweidimensionale Darstellung erhält man ebenfalls für beliebiges λ wenn $r = 0$ ist. Sie ergibt sich, indem man in den Ausdrücken für $\mathcal{A}, \mathcal{U}$ und $\mathcal{V}$ den Parameter r null setzt. Mit dieser Darstellung lassen sich die physikalischen Eigenschaften des Grenzwerts $q \to \infty$ bestimmen. Darüber hinaus kann auch eine Entwicklung der Darstellung für große q (kleine r) durchgeführt und der Strom für diesen Grenzfall analytisch berechnet werden. Dies wird in Abschnitt 4.3 ausgeführt.
Im folgenden soll zunächst beschrieben werden, wie die Darstellungen der Algebra (4.2) zur Berechnung physikalischer Größen im kanonischen Ensemble (vorgegebene Teilchenzahlen) verwendet werden (Abschnitt 4.1). Daran anschließend wird ein großkanonischer Formalismus eingeführt (Abschnitt 4.2), der Berechnungen vereinfacht und des weiteren zusätzliche interessante Eigenschaften aufweist (Kapitel 10).

4.1. Das kanonische Ensemble

Im kanonischen Ensemble sind die Teilchenzahlen n_1, n_2 und $n_0 = L - n_1 - n_2$ fest vorgegeben. Eine normierte, stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung $P^{(\mathrm{k})}_{n_1,n_2}((\beta))$ kann aus

(2.21) in Verbindung mit (4.2) und (4.3) gewonnen werden:

$$P^{(\mathrm{k})}_{n_1,n_2}(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_L) = \frac{1}{Z_L^{n_1,n_2}} F^{\mathrm{k}}_{n_1,n_2}(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_L) \tag{4.14}$$

mit einem Normierungsfaktor $Z_L^{n_1,n_2}$ und

$$\begin{aligned} F^{(\mathrm{k})}_{n_1,n_2}(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_L) = {} & \mathrm{Spur}\,(G_{\beta_1}\,G_{\beta_2}\,\cdots G_{\beta_L}) \\ & \times\delta(\sum_{k=1}^{L}\delta(\beta_k-1)-n_1)\,\delta(\sum_{k=1}^{L}\delta(\beta_k-2)-n_2)\ . \end{aligned} \tag{4.15}$$

Eine Größe, die bei der Untersuchung des Kondensationsmodells eine große Rolle spielt, ist der Strom der Teilchen. Der Stromoperator für Teilchen der Sorte "1" wird durch

$$\begin{aligned} \hat{J}_1\,({u_{\beta_1}}^{(1)}\otimes {u_{\beta_2}}^{(2)}\otimes\ldots\otimes {u_{\beta_L}}^{(L)}) = {} & (\lambda\,\delta(\beta_{L-1}-1)\,\delta(\beta_L)+q\,\delta(\beta_{L-1}-1)\,\delta(\beta_L-2) \\ & -\delta(\beta_{L-1}-2)\,\delta(\beta_L-1))\quad {u_{\beta_1}}^{(1)}\otimes {u_{\beta_2}}^{(2)}\otimes\ldots\otimes {u_{\beta_L}}^{(L)} \end{aligned} \tag{4.16}$$

definiert, siehe (2.10) und (4.1). Dieser Operator beschreibt den Strom zwischen den Gitterplätzen $L-1$ und L. Für den stationären Zustand ist diese Positionierung irrelevant; der Strom zwischen zwei beliebigen benachbarten Gitterplätzen ergibt aufgrund der Teilchenzahlerhaltung denselben Wert. Aus den Gleichungen (4.14) bis (4.16) und der Algebra (4.2) berechnet sich der mittlere Strom J_1 der "1"-Teilchen im stationären Zustand:

$$\begin{aligned} J_1 = \frac{\lambda}{Z_L^{n_1,n_2}} \sum_{\beta_1,\ldots,\beta_{L-2}} & [\mathrm{Spur}(G_{\beta_1}\,G_{\beta_2}\,\cdots G_{\beta_{L-2}}\,G_0) \\ & \quad\times\delta(\sum_{k=1}^{L-2}\delta(\beta_k-1)-n_1+1)\,\delta(\sum_{k=1}^{L-2}\delta(\beta_k-2)-n_2) \\ & +\mathrm{Spur}(G_{\beta_1}\,G_{\beta_2}\,\cdots G_{\beta_{L-2}}\,(G_1+G_2)) \\ & \quad\times\delta(\sum_{k=1}^{L-2}\delta(\beta_k-1)-n_1+1)\,\delta(\sum_{k=1}^{L-2}\delta(\beta_k-2)-n_2+1)] \end{aligned} \tag{4.17}$$

Der Strom für die "2"-Teilchen wird durch einen analogen Ausdruck gegeben*. An dieser Stelle ist es von Nutzen, die Fouriertransformation des Kronecker-Deltasymbols

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{L+1}\sum_{k=0}^{L}\exp(\frac{2\pi\mathrm{i}}{L+1}k) \qquad\qquad \alpha = 0,\ldots,L \tag{4.18}$$

zu verwenden. Definiert man

$$B^{(L)}_{r,s} := G_0 + \exp(\frac{2\pi\mathrm{i}}{L}r)G_1 + \exp(\frac{2\pi\mathrm{i}}{L}s)G_2\ , \tag{4.19}$$

so erhält man unter Verwendung der Algebrarelationen für die kanonische Zustandssumme $Z_L^{n_1,n_2}$ und für den Strom von "1"- und "2"-Teilchen die Ausdrücke:

$$Z_L^{n_1,n_2} = \frac{1}{(L+1)^2}\sum_{r,s=0}^{L}\exp\left(-2\pi\mathrm{i}\left(r\frac{n_1}{L+1}+s\frac{n_2}{L+1}\right)\right)\mathrm{Spur}\left((B^{(L+1)}_{r,s})^L\right) \tag{4.20}$$

* Beide Ströme werden als positive Größen definiert.

$$J_1 = \frac{\lambda}{Z_L^{n_1,n_2}(L+1)^2}\sum_{r,s=0}^{L}\exp\left(-2\pi\mathrm{i}\left(r\frac{n_1-1}{L+1}+s\frac{n_2}{L+1}\right)\right)\mathrm{Spur}\left((B_{r,s}^{(L+1)})^{L-2}B_{s,s}^{(L+1)}\right) \quad (4.21)$$

$$J_2 = \frac{\lambda}{Z_L^{n_1,n_2}(L+1)^2}\sum_{r,s=0}^{L}\exp\left(-2\pi\mathrm{i}\left(r\frac{n_1}{L+1}+s\frac{n_2-1}{L+1}\right)\right)\mathrm{Spur}\left((B_{r,s}^{(L+1)})^{L-2}B_{r,r}^{(L+1)}\right) \quad (4.22)$$

Analog können auch die Korrelationsfunktionen formuliert werden.
Die Berechnung der Ströme erfolgte numerisch mit einem Computer. In den Ausdrücken (4.20) bis (4.22) ergeben diejenigen Terme, die keinen Faktor G_0 enthalten, vor Anwendung der Spuroperation in der Summe null. Die Spur läßt sich für jeden der übrigen Terme durch ein $(1,1)$-Matrixelement ersetzen, wie man an der Form von G_0 (4.6) erkennt. In einer konkreten Berechnung für endliche Gitter (q, λ und L seien gegeben) können daher die Darstellungen (4.5) und (4.6) für G_α bei einer endlichen Dimension abgeschnitten werden, da nur die Matrixelemente $\{G_\alpha\}_{j,k}$ mit Indizes $j,k < L/2+3$ in die Berechnung des (1,1)-Matrixelements eines Produkts von $L-1$ Faktoren G_α eingehen.
Es bleibt jedoch die Berechnung der Doppelsumme über r und s. Diese macht es schwierig bzw. langwierig, den Strom für große L zu berechnen, so daß mit dem kanonischen algebraischen Formalismus nur $L = 30$ erreicht werden konnte. Die Werte zeichnen sich allerdings durch eine hohe Genauigkeit aus. Da gerade in der besonders interessanten gemischten Phase der Strom nur langsam zu seinem Grenzwert für $L \to \infty$ konvergiert, konnte dieser nicht allein aus den Ergebnissen der Matrixproduktmethode für das kanonische Ensemble bestimmt werden. Mit Monte-Carlo-Simulationen (Kapitel 5), im großkanonischen Ensemble (Abschnitt 4.2) und durch Lösung der *mean-field*-Gleichungen (Kapitel 6) können wesentlich größere Gitter untersucht werden (vgl. die Diskussion in Kapitel 7).

4.2. Ein großkanonisches Ensemble

Im Gegensatz zur Situation in der statistischen Gleichgewichtsmechanik ist für die Nichtgleichgewichtsdiffusionssysteme dieser Arbeit die Definition eines großkanonischen Ensembles aufgrund der Teilchenzahlerhaltung nicht eindeutig festgelegt. Im Prinzip kann man für die Mastergleichung (2.3) zum Zeitpunkt t=0 als Anfangsbedingung eine Wahrscheinlichkeitsverteilung festlegen, die beliebige Anteile an den Teilchenzahlsektoren besitzt. Für das Kondensationsmodell mit den erhaltenen Teilchenzahlen n_1 und n_2 läßt sich eine Anfangsverteilung als

$$P_{\mu_1,\mu_2}(\beta_1,\ldots,\beta_L;t=0) = \sum_{\substack{n_1,n_2=0\\ n_1+n_2\le L}}^{L} Q(\beta_1,\ldots,\beta_L;n_1,n_2;t=0)\exp(\mu_1 n_1+\mu_2 n_2) \quad (4.23)$$

schreiben mit den Fugazitäten

$$z_1 := e^{\mu_1}, \qquad z_2 := e^{\mu_2}\ . \quad (4.24)$$

Die Beiträge $Q(\beta_1,\ldots,\beta_L;n_1,n_2;t=0)$ seien dann von null verschieden, wenn in $(\beta_1,\ldots,\beta_L)$ gerade n_1 "1"-Teilchen und n_2 "2"-Teilchen vorkommen. Sie sind so zu wählen, daß – wie in der statistischen Gleichgewichtsmechanik – durch Variation von μ_1 und μ_2 vorgegebene Dichten

ρ_1 und ρ_2 eingestellt werden können:

$$\rho_\alpha = \frac{<n_\alpha>}{L} = \frac{1}{L} \sum_{n_1,n_2} \left(n_\alpha \sum_{(\beta)} Q(\beta_1,\ldots,\beta_L;n_1,n_2;t) \exp(\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2) \right) \tag{4.25}$$

für beliebige t. Abgesehen hiervon bleibt die Abhängigkeit der "kanonischen Anteile" Q von n_1 und n_2 unbestimmt. Jede Anfangsbedingung (4.23) determiniert ein stationäres Wahrscheinlichkeitsmaß im Limes $t \to \infty$, das als großkanonisches Ensemble aufgefaßt werden kann.

In dieser Arbeit wird ein spezielles großkanonisches Ensemble gewählt, das durch die Generatoren der quadratischen Algebra definiert wird. Mit der Bezeichnung (4.15) ist ein allgemeines stationäres Ensemble durch

$$P_{\mu_1,\mu_2}(\beta_1,\ldots,\beta_L) = \frac{1}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \sum_{\substack{n_1,n_2=0 \\ n_1+n_2 \leq L}}^{L} \frac{F^{(\mathrm{k})}_{n_1,n_2}(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_L)}{f^L_{n_1,n_2}} \exp(\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2) \tag{4.26}$$

gegeben. In dieser Gleichung sind die Faktoren $f^L_{n_1,n_2}$ zunächst beliebig. Das großkanonische Ensemble sei durch die Wahl $f^L_{n_1,n_2} = 1$ definiert, also

$$\begin{aligned} P^{(\mathrm{gk})}_{\mu_1,\mu_2}(\beta_1,\ldots,\beta_L) &= \frac{1}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \mathrm{Spur}\,(G_{\beta_1}\, G_{\beta_2}\, \cdots G_{\beta_L}) \exp(\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2) \\ &= \frac{1}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \mathrm{Spur}\,(E_{\beta_1}\, E_{\beta_2}\, \cdots E_{\beta_L}) \end{aligned} \tag{4.27}$$

mit

$$E_0 := G_0\ , \qquad E_1 := z_1 G_1\ , \qquad E_2 := z_2 G_2\ . \tag{4.28}$$

Im Gegensatz zum kanonischen Fall hat die Normierungskonstante (d.h. die Zustandssumme) des großkanonischen Ensembles, die einfache Form

$$Z_L^{\mu_1,\mu_2} = \mathrm{Spur}\left(C^L\right) \tag{4.29}$$

mit

$$C = E_0 + E_1 + E_2\ . \tag{4.30}$$

Die quadratische Algebra der Matrixproduktmethode kann in verschiedenen, jeweils zu (4.2) isomorphen Formen geschrieben werden, indem man anstelle der G_α Generatoren $d_\alpha G_\alpha$ wählt. Man erhält auf diese Weise zwei freie Parameter als Funktionen von q und λ.* Auch wenn man das großkanonische Ensemble mit einer den stationären Zustand beschreibenden quadratischen Algebra definiert, besteht also die Freiheit, in (4.27) und (4.24) die Definition (4.28) durch

$$E_0 = d_0 G_0, \qquad E_1 = d_1 z_1 G_1, \qquad E_2 = d_2 z_2 G_2 \tag{4.31}$$

zu ersetzen. Die Wahl von (4.27) ist nur dadurch ausgezeichnet, daß die Algebra in der Form (4.2) die wenigsten von eins verschiedenen Faktoren enthält. Außerdem läßt sie sich direkt mit Quantenalgebren in Verbindung bringen [37]. Inwieweit eine von (4.27) verschiedene Definition

* Ein dritter Parameter entspricht der Normierung $Z_L^{\mu_1,\mu_2}$.

des großkanonischen Ensembles neben den Resultaten für endliche Gitterlängen auch den thermodynamischen Limes $L \to \infty$ beeinflußt, wurde bisher nicht systematisch untersucht. Dies gilt auch für die verwandten Diffusionmodelle aus [17] und [34]; in diesen Arbeiten wurde ebenfalls eine Definition eines großkanonischen Ensembles verwendet, die (4.27) entspricht. Eine weiterführende Analyse des großkanonischen Ensembles wird in Kapitel 11 durchgeführt werden.
An dieser Stelle sei zur Verdeutlichung der Bedeutung der quadratischen Algebra eine Zwischenbemerkung angeführt. Eine weitere Standardmöglichkeit, ein großkanonisches Ensemble für Reaktions-Diffusionssysteme mit Teilchenzahlerhaltung zu definieren, erscheint auf den ersten Blick durch

$$P^{(\mathrm{gk2})}_{\mu_1,\mu_2}(\beta_1,\ldots,\beta_L) = \frac{1}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \sum_{n_1,n_2} P^{(\mathrm{k})}_{n_1,n_2}(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_L)\exp(\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2)$$

mit $P^{(\mathrm{k})}_{n_1,n_2}(\beta_1,\ldots,\beta_L)$ gemäß (4.14, 4.15) gegeben zu sein. Die Dichteverteilung dieses Ensembles besitzt jedoch kein Maximum bei ihrem Mittelwert. Der Ansatz führt daher nicht zum Ziel, wie man auch an folgendem Beispiel erkennt: Betrachtet man den vollständig symmetrischen Fall $q = 3, \lambda = 1$ (vgl. 4.11), so erhält man für die Dichte

$$\rho_\alpha^{(\mathrm{gk2})} = \frac{\sum_{n1,n2} \frac{n_\alpha}{L} z_1^{n_1} z_2^{n_2}}{\sum_{n1,n2} z_1^{n_1} z_2^{n_2}}$$

und für die Korrelationsfunktion $c_{1,2} = c_{1,2}(R)$ unabhängig vom Abstand R

$$c_{1,2}^{(\mathrm{gk2})} = \frac{\sum_{n1,n2} \frac{n_1 n_2}{L(L-1)} z_1^{n_1} z_2^{n_2}}{\sum_{n1,n2} z_1^{n_1} z_2^{n_2}} \; .$$

Mit dem großkanonischen Ensemble (4.27) erhält man hingegen

$$\rho_\alpha = \frac{z_\alpha}{1 + z_1 + z_2} \; , \qquad c_{1,2}^{(\mathrm{gk})} = \frac{z_1 z_2}{(1 + z_1 + z_2)^2} = \rho_1 \rho_2 \; . \tag{4.32}$$

Nur das mit Hilfe der quadratischen Algebra definierte Ensemble ergibt das richtige Ergebnis $c_{1,2} = \rho_1\rho_2$, das auch für das kanonische Ensemble im Grenzfall $L \to \infty$ herauskommt.
Der Dichteoperator für Teilchen der Sorte α am Gitterplatz k ist gemäß (2.10) durch

$$\begin{aligned} &\hat\rho_\alpha(k)\;({u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)}) = \delta(\beta_k - \alpha) \quad {u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)} \\ &\qquad\qquad \alpha = 0,1,2\,, \qquad k = 1,\ldots,L \end{aligned} \tag{4.33}$$

definiert. Der Teilchenzahloperator ist durch $\hat n_\alpha := \sum_k \hat\rho_\alpha(k)$ gegeben. Die Fugazitäten werden daher im translationsinvarianten großkanonischen Ensemble (4.27) durch

$$\rho_\alpha = \rho_\alpha(k) = <\hat\rho_\alpha(k)> = \frac{<\hat n_\alpha>}{L} = \frac{\mathrm{Spur}(z_\alpha G_\alpha C^{L-1})}{\mathrm{Spur}(C^L)} = \frac{z_\alpha}{L}\frac{\partial \log Z_L^{\mu_1,\mu_2}}{\partial z_\alpha} \tag{4.34}$$

festgelegt. Die Fluktuationen der Teilchenzahlen um ihren Mittelwert $<\hat N_\alpha>$ sind durch

$$\Delta {N_\alpha}^2 = \frac{\partial^2 \log Z_L^{\mu_1,\mu_2}}{\partial \log {z_\alpha}^2} \tag{4.35}$$

gegeben. Eine allgemeine Zweipunktkorrelation zwischen Teilchen der Sorten α und β an den Gitterplätzen k und j wird durch den Operator

$$\begin{aligned} &\hat c_{\alpha,\beta}(k,j)\;({u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)}) = \delta(\beta_k - \alpha)\delta(\beta_j - \beta) \quad {u_{\beta_1}}^{(1)} \otimes \ldots \otimes {u_{\beta_L}}^{(L)} \\ &\qquad\qquad \alpha = 0,1,2\,,\; k = 1,\ldots,L \end{aligned} \tag{4.36}$$

beschrieben. Aus Gleichung (4.27) ergeben sich für den translationsinvarianten stationären Zustand die Zweipunktfunktionen zwischen Teilchen der Sorten α und β mit einem Abstand von R Gitterpunkten

$$c_{\alpha,\beta}(R) = \frac{1}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \mathrm{Spur}(z_\alpha G_\alpha C^{R-1} z_\beta G_\beta C^{L-R-1}) \ . \tag{4.37}$$

Hat die Matrix C die zwei größten, nicht entarteten Eigenwerte $\lambda_1 > \lambda_2$ und ist in derjenigen Basis, in der die entsprechenden Eigenvektoren die Basisvektoren 1 und 2 ausmachen, das Produkt $\{G_\alpha\}_{1,2} \cdot \{G_\beta\}_{2,1}$ von null verschieden, so hat die Zweipunktfunktion für große Abstände R im Grenzfall $L \to \infty$ die Form

$$\begin{aligned} &c_{\alpha,\beta}(R) \propto \exp(-MR) + \mathrm{const.} \\ &M = \log \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \ . \end{aligned} \tag{4.38}$$

Man erwartet daher für endlichdimensionale Darstellungen eine endliche Korrelationslänge M. Für die Ströme (4.16) kann analog zu den Zweipunktfunktionen und unter Benutzung der Algebrarelationen (4.2) der Ausdruck

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{\lambda z_1}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \mathrm{Spur}\left((G_0 + z_2(G_1 + G_2))C^{L-2}\right) \\ J_2 &= \frac{\lambda z_2}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \mathrm{Spur}\left((G_0 + z_1(G_1 + G_2))C^{L-2}\right) \end{aligned} \tag{4.39}$$

hergeleitet werden.
Für den Fall, daß die Dichten von “1”- und “2”-Teilchen gleich sind, ergibt sich

$$z := z_1 = z_2 \ , \qquad \mu := \mu_1 = \mu_2 \ . \tag{4.40}$$

Die Ausdrücke für den Strom vereinfachen sich damit zu

$$J_1 = J_2 = \lambda z \frac{Z_{L-1}^{\mu_1,\mu_2}}{Z_L^{\mu_1,\mu_2}} \ . \tag{4.41}$$

Die Berechnung der Ströme erfordert im großkanonischen Ensemble keinerlei Kombinatorik oder Summation wie im kanonischen Ensemble.
In den Ausdrücken (4.27), (4.29), (4.37) und (4.39) wurde vorausgesetzt, daß alle Spuroperationen existieren. Dies ist für die unendlichdimensionale Darstellung nicht der Fall, wenn ein Produkt von Generatoren kein G_0 enthält. Der einfachste Weg, diese Schwierigkeit zu vermeiden, besteht darin, in der Definition des großkanonischen Ensembles (4.27) die Gewichte von Konfigurationen mit $n_1 + n_2 = L$ null zu setzen, d.h. das Ensemble so zu definieren, daß immer mindestens ein “0”-Teilchen vorhanden ist⋆. Dies bedeutet technisch, daß, sofern nicht bereits ein G_0-Faktor vorhanden ist, aus den Ausdrücken (4.29), (4.37) und (4.39) jeweils Summen werden, bei denen in jedem Summanden eine jeweils andere der C-Matrizen durch G_0/L ersetzt ist. Aufgrund der Form der Matrix G_0 (siehe Gleichung (4.5)) ist dann für jeden Term die Spur durch ein $(1,1)$-Matrixelement gegeben. Wie beim kanonischen Ensemble ergibt sich daher, daß für eine konkrete Rechnung bei Gitterlänge L nur diejenigen

⋆ Der Zweiteilchengrenzfall $\rho_1 + \rho_2 = 1$ ist physikalisch uninteressant, da er einen vollständig symmetrischen stationären Zustand besitzt.

Matrixelemente $\{G_\alpha\}_{j,k}$ mit Indizes $j,k < L/2+3$ berücksichtigt werden müssen (vgl. die Diskussion in Abschnitt 4.1).
Numerische Berechnungen wurden wiederum mit einem Computer durchgeführt. Für Korrelationsfunktionen und Strom wurde dabei eine Gitterlänge $L = 300$ erreicht (kanonisches Ensemble: $L = 30$), was eine numerische Extrapolation mit dem Bulirsch-Stoer-Algorithmus [49] zum thermodynamischen Grenzwert ermöglichte, vgl. die folgenden Kapitel.

4.3. Die Entwicklung für große q im großkanonischen Ensemble

Die Darstellung der Algebra (4.2) läßt sich für große q (kleine r) entwickeln. In diesem Abschnitt wird der Strom in linearer Ordnung in r berechnet werden.
Wenn man in (4.5) und (4.6) nur Terme a_k und $f_k t_k$ linear in r berücksichtigt, so sind die einzigen von null verschiedenen Matrixelemente von G_1 und G_2 durch

$$\begin{aligned} &a_1 = 1 \;, \qquad a_2 = (1+\lambda)r \;, \qquad a_k = \lambda r \quad (k \geq 3) \\ &f_1 t_1 = (2\lambda+1)r - 1 \;, \qquad f_2 t_2 = -r \end{aligned} \tag{4.42}$$

gegeben. Es reicht also aus, die Generatoren G_α durch dreidimensionale Matrizen darzustellen. Man überprüft, daß sich mit dieser Darstellung

$$G_1 G_2 - r\left(G_2 G_1 + \lambda(G_1 + G_2)\right) = r^{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\lambda) \\ 0 & (1+\lambda) & 0 \end{pmatrix} \tag{4.43}$$

ergibt, was die Konsistenz des Ansatzes zeigt. Hier wurde eine Darstellung mit $\mathcal{U} = -\mathcal{V}^T$ gewählt, vgl. Gleichung (4.5). Wenn man auch die linearen Terme in r vernachlässigt, so erhält man

$$G_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \;, \quad G_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \;, \quad G_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.44}$$

als Darstellung für den Grenzfall $q \to \infty$. Im folgenden wird das großkanonische Ensemble linear in r betrachtet. Die Matrix C (siehe (4.28) und (4.30)) wird mit (4.42) zu

$$C = \begin{pmatrix} 1 + z_1 + z_2 & z_1(1 - \frac{2\lambda+1}{2} r) & 0 \\ -z_2(1 - \frac{2\lambda+1}{2} r) & (1+\lambda)(z_1+z_2)r & z_1 r^{\frac{1}{2}} \\ 0 & -z_1 r^{\frac{1}{2}} & \lambda(z_1+z_2)r \end{pmatrix} . \tag{4.45}$$

Der größte Eigenwert von C sei durch die Entwicklung

$$\lambda_1(z_1,z_2) = \lambda_1^{(0)}(z_1,z_2) + r\lambda_1^{(1)}(z_1,z_2) + \dots \tag{4.46}$$

gegeben. Die Teilchendichten seien gleich:

$$\rho := \rho_1 = \rho_2 \tag{4.47}$$

Damit können Fugazitäten und Ströme als

$$\begin{aligned} &z(\rho) = z_1(\rho_1) = z_2(\rho_2) = z^{(0)}(\rho) + r z^{(1)}(\rho) + \dots \\ &J = J_1 = J_2 = J^{(0)}(\rho) + r J^{(1)}(\rho) + \dots \end{aligned} \tag{4.48}$$

geschrieben werden. Die führende Ordnung wird durch die 2×2 Matrizen (4.44) bestimmt. Die Eigenwerte der korrespondierenden C-Matrix sind

$$\lambda_{1/2}^{(0)} = \frac{1}{2}\left(1 + z_1 + z_2 \pm \sqrt{(1 + z_1 + z_2)^2 - 4z_1 z_2}\right) . \tag{4.49}$$

Mit den Gleichungen (4.29) und (4.34) ergibt sich:

$$z^{(0)}(\rho) = \frac{\rho(1-\rho)}{(1-2\rho)^2} \tag{4.50}$$

Setzt man dieses Ergebnis in (4.49) ein, so findet man für die Eigenwerte der Matrix C bei gegebener Dichte ρ:

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(0)}(z, z) &= \left(\frac{1-\rho}{1-2\rho}\right)^2 \\ \lambda_2^{(0)}(z, z) &= \left(\frac{\rho}{1-2\rho}\right)^2 \end{aligned} \tag{4.51}$$

Aus Gleichung (4.38) ergibt sich nun die nullte Ordnung der inversen Korrelationslänge

$$M = 2\log\left(\frac{1-\rho}{\rho}\right) . \tag{4.52}$$

Diese Masse verschwindet für den maximalen Wert der Dichte ($\rho = 1/2$) und divergiert, wenn die Dichte gegen null geht. Man kann nun eine Näherung der Zustandssumme für große L benutzen

$$Z_L^{\mu,\mu} = \left(\lambda_1^{(0)}\right)^L \tag{4.53}$$

und erhält aus Gleichung (4.41) den Strom

$$J^{(0)} = \frac{\lambda\rho}{1-\rho} \tag{4.54}$$

in nullter Ordnung in r.
Für die lineare Ordnung in r benutzt man den Ausdruck (4.45) für die Matrix C, um zunächst die Korrektur des größten Eigenwertes zu berechnen. Man findet:

$$\lambda_1^{(1)}(z_1, z_2) = \frac{\alpha\left(\lambda_1^{(0)}\right)^2 - \beta\lambda_1^{(0)} + \gamma}{3\left(\lambda_1^{(0)}\right)^3 - 2a\lambda_1^{(0)} + z_1 z_2} \tag{4.55}$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \alpha &= (1 + 2\lambda)(a - 1) \\ \beta &= (1 + 2\lambda)a(a - 1) - 2\lambda z_1 z_2 \\ \gamma &= ((1 + \lambda)a - \lambda)\, z_1 z_2 \\ a &= 1 + z_1 + z_2 . \end{aligned} \tag{4.56}$$

Man verfährt nun ähnlich wie für die nullte Ordnung und erhält

$$\lambda_1^{(1)}(z, z) = \rho^2 \frac{1 + 2\lambda - 2\rho - 2\lambda\rho}{(1-2\rho)^2}$$

$$z^{(1)} = -\rho^2 \frac{\lambda + (1 - 3\rho + \rho^2)(1 + \lambda)}{(1-\rho)^2\,(2\rho^2 + 1 - 2\rho)} \tag{4.57}$$
$$J^{(1)} = -\rho^2 \lambda \frac{1 + 2\lambda - \rho(6 + 9\lambda) + \rho^2(12 + 13\lambda) - \rho^3(6 - 2\lambda) - \rho^4(6 + 8\lambda) + 4\rho^5(1 + \lambda)}{(1-\rho)^4\,(2\rho^2 + 1 - 2\rho)} .$$

Hieraus ersieht man z. B., daß sich für festes λ der Strom seinem Grenzwert für $q \to \infty$ von unten her nähert.

5. Simulationen: Diskussion der Methode

Das Kondensationsmodell (4.1) läßt sich auch anhand von Monte-Carlo-Simulationen untersuchen. Damit können sowohl stationäre als auch nichtstationäre Eigenschaften bestimmt werden, während die Matrixproduktmethode nur zur Bestimmung stationärer Zustände dient.

5.1. Messung von Observablen

Bei einer Monte-Carlo-Simulation wird in jedem "Simulationslauf" die Zeitentwicklung einer einzelnen Konfiguration $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$ für ein endliches Gitter betrachtet. Diese erfolgt probabilistisch gemäß den Übergangsraten der Mastergleichung. Ein Wahrscheinlichkeitsmaß $P(\beta_1, \ldots, \beta_L; t = 0)$ für den Anfangszustand legt die relative Häufigkeitsverteilung der Startkonfigurationen $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t = 0)$ fest. Die Simulationsschritte sind so zu wählen, daß die relative Häufigkeitsverteilung der $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$, die aus den $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t = 0)$ hervorgehen, in genügender Näherung durch $P(\beta_1, \ldots, \beta_L; t)$ gegeben ist. Wie man dies im einzelnen erreichen kann, ist im zweiten Abschnitt dieses Kapitels dargelegt.
Die Eigenschaften der Wahrscheinlichkeitszustände $|P(t) >$ ergeben sich durch Mittelung über die Ergebnisse mehrerer Simulationsläufe. In der Praxis beschränkt man sich auf die Messung einzelner Observablen, d.h. reeller Funktionen auf den Konfigurationen $(\beta_1, \ldots, \beta_L)$, definiert entsprechend den Operatoren $\hat{O}$ aus Gleichung (2.10). Die Werte dieser Funktionen für die Konfigurationen $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$ sind die "Meßwerte" und konvergieren im allgemeinen wesentlich schneller gegen ihren Erwartungswert als die relative Häufigkeitsverteilung der Konfigurationsfolgen $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$ gegen die vollständige Wahrscheinlichkeitsverteilung $|P(t) >$. Als Limes erhält man natürlich den Meßwert, der sich auch aus $|P(t) >$ ergeben würde, vgl. Gleichung (2.11).
Zur Bestimmung stationärer Eigenschaften beginnt man mit einer Messung erst nach einer Initialisierungsphase, in der eine Anzahl von Monte-Carlo-Schritten ohne Messung ausgeführt wird. Die Initialisierungszeit t_0 ist so zu wählen, daß die relative Häufigkeitsverteilung der $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t_0)$ in genügender Näherung durch das stationäre Maß $P_0(\beta_1, \ldots, \beta_L)$ gegeben ist. Damit wird auch die relative Häufigkeitskeitsverteilung der $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$ für $t \geq t_0$ durch $P_0(\beta_1, \ldots, \beta_L)$ bestimmt. Den stationären Mittelwert einer Observablen erhält man, indem man für $t \geq t_0$ die Meßwerte bestimmt, die sich aus den $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$ ergeben, und über diese sowie über mehrere Simulationsläufe mittelt. Eine Abschätzung für das benötigte t_0 ergibt sich aus der Beobachtung der Zeitabhängigkeit gemittelter Meßgrößen.
Die Mittelung über mehrere Simulationsläufe ergibt oft eine bessere Konvergenz als ein einzelner langer Simulationslauf*. Dies gilt insbesondere bei großen Übergangszeiten zwischen verschiedenen Werten einer makroskopischen Größe. Für jeden Simulationslauf geht man von einer zufällig gewählten Anfangskonfiguration aus und läßt eine Initialisierungsphase ohne Messung verstreichen.
Bei der Messung lokaler Größen kann darüber hinaus die Translationsinvarianz des stationären Zustands ausgenutzt werden. Lange Übergangszeiten, die die Messung lokaler Größen schwierig machen, lassen sich durch Mittelung über die lokale Größe an allen Gitterplätzen umgehen. Dieser Mittelwert stimmt für stationäre Meßgrößen mit dem lokalen Wert überein.
In einem einzelnen Monte-Carlo-Schritt kann sich die Konfiguration nicht wesentlich ändern. Es kann daher von Vorteil sein, eine Größe nicht nach jedem, sondern erst nach einer bestimmten

* Für diesen benötigt man keine Initialisierungsphase.

Anzahl von Monte-Carlo-Schritten zu ermitteln.

5.2. Algorithmen zur Bestimmung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Im folgenden wird der Algorithmus beschrieben, der die Zeitentwicklung einer Konfiguration während eines Monte-Carlo-Simulationslaufs bestimmt.
Die kontinuierliche Zeitentwicklung der Mastergleichung (2.3) wird in Zeitschritte Δt diskretisiert, d.h. statt Wahrscheinlichkeitsraten für die möglichen Prozesse werden Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen verschiedenen Konfigurationen verwendet. Ausgehend von einer Startkonfiguration $(\alpha_1, \ldots, \alpha_L)(t)$, wählt man mit Hilfe einer gleichverteilten Zufallszahl eines der möglichen Paare benachbarter Konfigurationen $(\alpha_1, \alpha_2), (\alpha_2, \alpha_3), \ldots, (\alpha_{L-1}, \alpha_L), (\alpha_L, \alpha_1)$ aus (*random sequential updating*). Einer der Übergänge, die gemäß den Raten der Mastergleichung für diese Paarkonfiguration möglich sind, wird ausgewählt und durchgeführt, oder aber das Konfigurationspaar bleibt unverändert. Die Wahl zwischen diesen Alternativen geschieht mit einer zwischen null und eins gleichverteilten Zufallszahl. Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang ist dabei so zu wählen, daß sie zu der Rate $\Gamma^{\alpha_1,\alpha_2}_{\beta_1,\beta_2}$ des entsprechenden lokalen Prozesses der Mastergleichung proportional ist. Es existiert also ein Ω, so daß für alle $(\alpha_k, \alpha_{k+1}) \neq (\beta_k, \beta_{k+1})$ die Wahrscheinlichkeit W des entsprechenden Übergangs durch

$$W\left[(\alpha_1 \ldots \alpha_k, \alpha_{k+1} \ldots \alpha_L)(t) \mapsto (\alpha_1 \ldots \alpha_{k-1}, \beta_k, \beta_{k+1}, \alpha_{k+2} \ldots \alpha_L)(t + \Delta t)\right] = \Omega \Gamma^{\alpha_k,\alpha_{k+1}}_{\beta_k,\beta_{k+1}} \quad (5.1)$$

gegeben ist. Dabei muß Ω natürlich so gewählt werden, daß die Summe der Wahrscheinlichkeiten der möglichen lokalen Prozesse kleiner oder gleich eins ist. Die Differenz zu eins entspricht der Wahrscheinlichkeit, daß in einem Monte-Carlo-Schritt die Konfiguration unverändert bleibt. Für Diffusionsprozesse ist für jede Paarkonfiguration höchstens ein Übergang möglich. Dies bedeutet, daß Ω kleiner oder gleich dem Kehrwert der maximalen Rate gewählt sein muß.
Die Endkonfiguration nach einer lokalen Änderung mit den Wahrscheinlichkeiten (5.1) ist die Konfiguration zur Zeit $t + \Delta t$, wobei der Zeitschritt Δt durch

$$\Delta t = \frac{\Omega}{L} \quad (5.2)$$

gegeben ist.
Man sieht leicht ein, daß man mit dem Algorithmus (5.1) die stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung erhält. Es gilt: Jede Wahl der Übergangswahrscheinlichkeiten der Form (5.1) liefert eine Zeitentwicklung $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$ der Konfigurationen, aus der durch Mittelung über eine Zeitspanne T eine relative Häufigkeitsverteilung $F_T(\beta_1, \ldots, \beta_L)$ abgeleitet werden kann, die sich dem stationären Maß $P_0(\beta_1, \ldots, \beta_L)$ mit T beliebig nähert. Darüber hinaus entspricht auf großen Zeitskalen $t \gg \Delta t$ die Zeitentwicklung der relativen Häufigkeitsverteilung der $(\beta_1, \ldots, \beta_L)(t)$, die sich aus Mittelung über eine große Anzahl von Simulationsläufen ergibt, gerade derjenigen der $P(\beta_1, \ldots, \beta_L, t)$ der Mastergleichung.
Für stationäre Größen, wie z.B. dem Strom, wurde getestet, daß die aus $F_T(\beta_1, \ldots, \beta_L)$ bestimmten Mittelwerte innerhalb statistischer Fehler mit exakt berechneten Werten aus Rechnungen mit der Matrixproduktmethode übereinstimmen. Bei der Messung nichtstationärer Größen wurde überprüft, daß eine Änderung der Zeitdiskretisierung, d.h. verschiedenes Ω in (5.1), keine Veränderungen des Meßwertes ergibt, die für die untersuchte Zeitskala relevant sind.

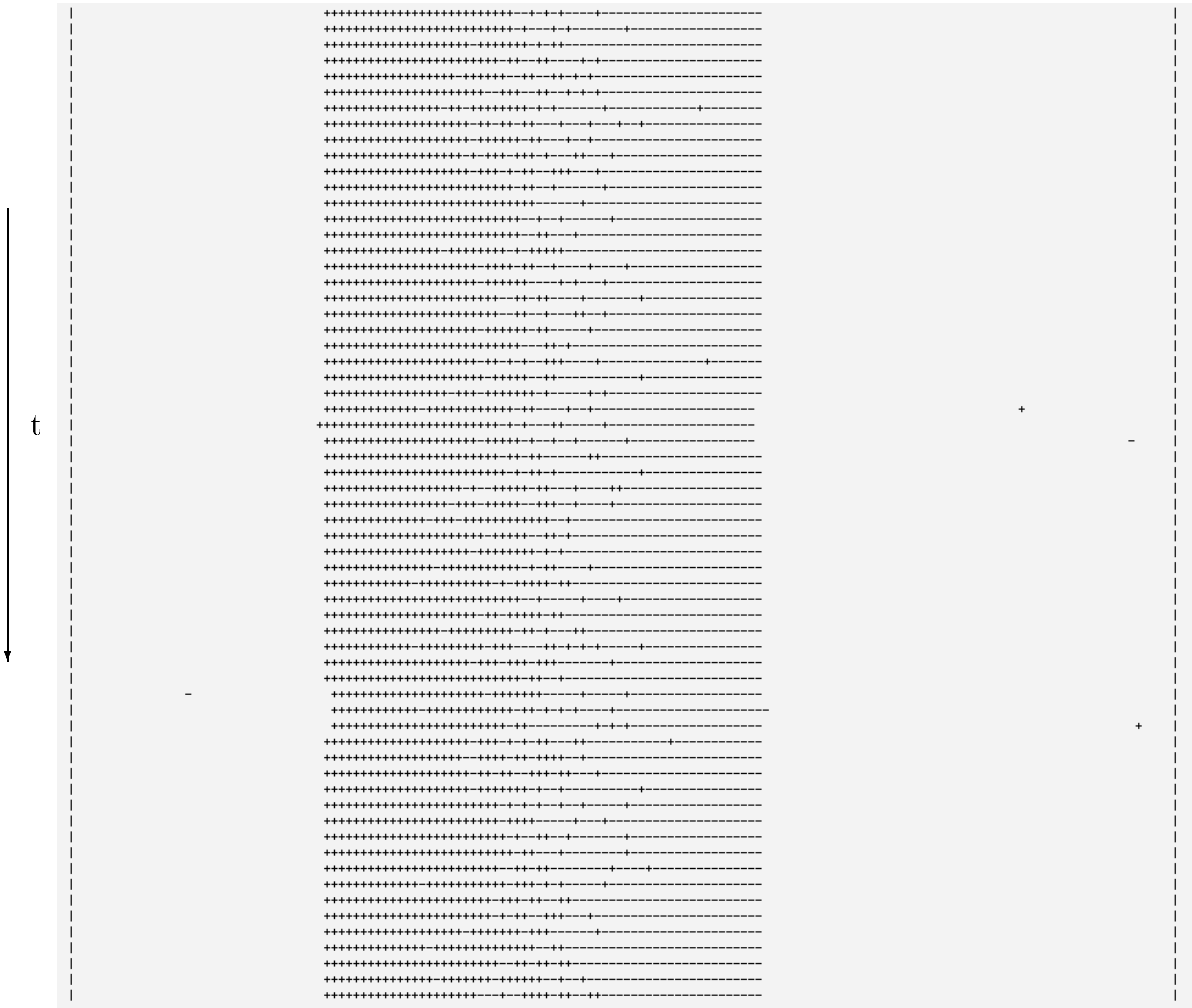

Abbildung 1. Simulation bei $\lambda = 1$, $q = 0.8$, $L = 150$, $n_+ = n_- = 30$.

Um lange Zeitskalen zu untersuchen, wie z.B. die Zeit, die der Block von Teilchen in der reinen oder in der gemischten Phase braucht, um sich über eine makroskopische Strecke zu bewegen, muß man mit dem Monte-Carlo-Algorithmus eine möglichst große Zeitskala simulieren können, ohne dabei Rücksicht auf die Eigenschaften der Simulation auf kurzen Zeitskalen nehmen zu müssen. Dazu und zur Simulation stationärer Eigenschaften wählt man in (5.1) die Proportionalitätskonstante Ω so, daß die maximale Wahrscheinlichkeit W für einen lokalen Monte-Carlo-Schritt gerade eins ist, d.h. wird eine Paarkonfiguration gewählt, für die dieser Prozeß möglich ist, so wird er auch immer ausgeführt. Dies ist ein Beispiel des allgemeinen Prinzips, nach dem der Anteil der Monte-Carlo-Schritte möglichst gering zu halten ist, bei denen keine Änderung der Konfiguration eintritt, vgl. [50]. Man wählt also Ω so, daß

$$\Delta t = \frac{1}{L \ \max\{\Gamma^{\alpha_1,\alpha_2}_{\beta_1,\beta_2} \,|\, \alpha_1 \neq \beta_1, \alpha \neq \beta_2\}} \tag{5.3}$$

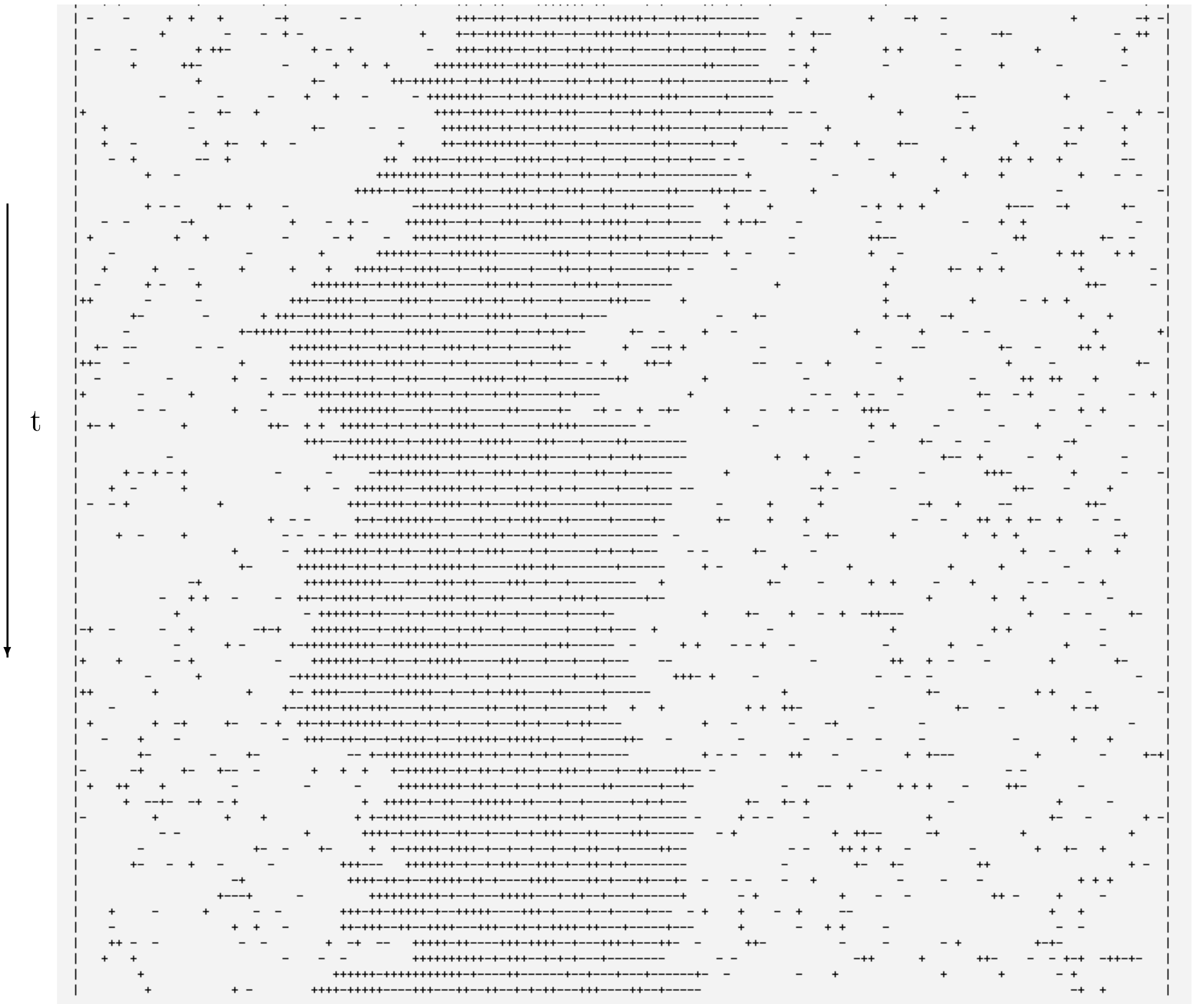

Abbildung 2. Simulation bei $\lambda = 1$, $q = 1.2$, $L = 150$, $n_+ = n_- = 30$.

ist. Dies ergibt den für diese Arbeit hauptsächlich verwendeten Algorithmus.
Die Abbildungen 1, 2 und 3 zeigen typische Ergebnisse für die reine, gemischte und ungeordnete Phase. Diese Bilder veranschaulichen wesentliche physikalische Phänomene des Kondensationsmodells, wie sie in den folgenden Kapiteln quantitativ behandelt werden. Man erkennt drei "sortenreine" Teilchenblöcke in Abbildung 1, ein Kondensat aus positiven und negativen Teilchen in Abbildung 2 und ein ungeordnetes Verhalten in Abbildung 3. Zwischen zwei Momentaufnahmen des Gitters liegen jeweils 100 Zeitschritte der Länge (5.3).

Im folgenden sollen andere Möglichkeiten für Simulationsalgorithmen diskutiert werden. Es sei zunächst vermerkt, daß für kleine Zeitschritte Δt, bei denen alle $W \ll 1$, statt der zufälligen Wahl des Konfigurationspaars auch eine Reihenfolge der Konfigurationspaare festgelegt werden kann.
Wie bereits erwähnt, ist der oben beschriebene Algorithmus zur Simulation einer

Abbildung 3. Simulation bei $\lambda = 1$, $q = 1.2$, $L = 150$, $n_+ = n_- = 30$.

kontinuierlichen Zeitentwicklung nur näherungsweise richtig. Um die Zeitentwicklung der Mastergleichung exakt wiederzugeben, muß man, wiederum von einer Startkonfiguration ausgehend, für jedes Gitterplatzpaar und jeden dort möglichen Prozeß eine Poisson-verteilte Zufallsvariable verwenden. Der Mittelwert der Zufallsvariable ist dabei durch die Wahrscheinlichkeitsrate für den jeweiligen Prozeß gegeben. Diejenige dieser "Uhren", die zuerst "abläuft", gibt dadurch den Prozeß und den Zeitpunkt für den nächsten Monte-Carlo-Schritt an. Daraufhin müssen für alle lokalen Prozesse, die nun möglich sind, neue Uhren gestartet werden, vgl. [51]. Dieser Algorithmus ist aufwendiger als der oben beschriebene, der mit festen Zeitschritten, zufälliger Wahl eines lokalen Konfigurationspaares und Durchführung bzw. Verwerfung der lokalen Prozesse arbeitet. Dafür simuliert er auf allen Zeitskalen das Verhalten eines durch die Mastergleichung (2.3) definierten Modells. Da für diese Arbeit nicht das Kurzzeitverhalten, sondern große Zeitskalen bzw. Eigenschaften des stationären Zustands von Interesse sind, wurde nur der schnellere Algorithmus mit festen Zeitschritten verwendet.

Die Simulationszeit war für die Präzision der Meßdaten der begrenzende Faktor.
Eine weiterführende Möglichkeit, die allerdings ebenfalls den Algorithmus komplizierter werden läßt, da zusätzlich zur Konfiguration des Gitters weitere Informationen gespeichert und verarbeitet werden müssen, besteht darin, ausgehend von dem oben beschriebenen Algorithmus mit festen Zeitschritten nur noch diejenigen Paare von Gitterplätzen für den nächsten Monte-Carlo-Schritt zuzulassen, an denen ein Prozeß überhaupt möglich ist. Nur unter diesen "aktiven" Paaren wird dann für jeden Monte-Carlo-Schritt ein Konfigurationspaar gewählt. Ein dort möglicher Prozeß wird dann durchgeführt, oder es findet kein Übergang statt. Da sich die aktiven Paare und deren Anzahl N_a nach einem solchen Schritt im allgemeinen geändert haben, ist der "reale" Zeitschritt zwischen solchen Vorgängen unterschiedlich groß. Mit einer Wahrscheinlichkeit von N_a/L wird in einem Schritt des zugrunde liegenden Algorithmus ein aktives Paar gewählt, also im Mittel nach einer Zeitspanne L/N_a (gemessen in den Einheiten des zugrunde liegenden Algorithmus). Definiert man den Zeitverlauf für den neuen Algorithmus so, daß immer *genau* nach dieser Zeit ein aktives Paar gewählt wird, so erhält man die Zeitschritte

$$\Delta t' = \frac{L}{N_a}\Delta t = \frac{1}{N_a \max\{\Gamma^{\alpha_1,\alpha_2}_{\beta_1,\beta_2} \,|\, \alpha_1 \neq \beta_1, \alpha \neq \beta_2\}} \,. \tag{5.4}$$

Dieser neue Algorithmus gibt die Zeitentwicklung auf Skalen größer als $\Delta t'$ richtig an. Er wurde in dieser Arbeit zur Bestimmung langer Übergangszeiten verwendet, da er in diesen Fällen, wo meist nur eine kleine Zahl aktiver Gitterplätze vorhanden ist, schneller ist als der ursprüngliche Algorithmus.
Die Programme, die die Simulationsrechnungen dieser Arbeit ausführten, wurden in C geschrieben. Sie liefen insgesamt viele Monate CPU Zeit lang, verteilt auf bis zu 20 Alpha-PCs und Workstations. Die längste Zeit benötigte naturgemäß die Bestimmung von Meßgrößen für die Phasen mit großen Übergangszeiten, also insbesondere für die reine Phase, in der die Translationssymmetrie gebrochen ist.

6. Berechnung der *mean-field*-Näherung

Für Reaktions-Diffusionsmodelle lassen sich vereinfachte dynamische Gleichungen aufstellen, wenn die Korrelationen zwischen Teilchen auf verschiedenen Gitterplätzen vernachlässigt werden. Diese Näherung wird als *mean-field*- oder Molekularfeldnäherung bezeichnet. Im allgemeinen liefert eine *mean-field*-Theorie keine exakten Ergebnisse. Jedoch lassen sich bei einigen Modellen Phasengrenzen exakt bestimmen. Dies gilt z.B. für die asymmetrischen Exklusionsmodelle, die in [7] und [9] untesucht werden, jedoch nicht für das Dreizustandsmodell aus [22], siehe [21].

Bei eindimensionalen Diffusionsmodellen geht man folgendermaßen vor: Man betrachtet ein endliches Gitter der Länge L. Der Dichteoperator $\hat{\rho}_\alpha(k)$ für Teilchen der Sorte $\alpha = 0, \ldots, N-1$ an Gitterplatz $k = 1, \ldots, L$ ist bereits in Gleichung (4.33) definiert worden. Für ein allgemeines periodisches Modell mit den Diffusionsraten $g_{\alpha,\beta} = \Gamma^{\alpha\beta}_{\beta\alpha}$ folgt aus der Mastergleichung (2.3):

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} <\hat{\rho}_\alpha(k)> = \sum_{\gamma=0,\,\gamma\neq\alpha}^{N-1} &\big(g_{\gamma,\alpha} <\hat{\rho}_\gamma(k)\,\hat{\rho}_\alpha(k+1)> + g_{\alpha,\gamma} <\hat{\rho}_\alpha(k-1)\,\hat{\rho}_\gamma(k)> \\ &- g_{\gamma,\alpha} <\hat{\rho}_\alpha(k)\,\hat{\rho}_\gamma(k+1)> - g_{\alpha,\gamma} <\hat{\rho}_\gamma(k-1)\,\hat{\rho}_\alpha(k)>\big) \qquad (6.1)\end{aligned}$$

Hierbei sind die Indizes modulo L definiert. Da Korrelationen vernachlässigt werden sollen, kann man

$$<\hat{\rho}_\alpha(j)\,\hat{\rho}_\beta(k)> = <\hat{\rho}_\alpha(j)><\hat{\rho}_\beta(k)> \qquad \alpha,\beta = 0,\ldots,N-1\,,\; j,k = 1,\ldots,L \qquad (6.2)$$

verwenden und erhält mit den Bezeichnungen $\rho_\alpha(k) = <\hat{\rho}_\alpha(k)>$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_\alpha(k) = \sum_{\gamma=0,\,\gamma\neq\alpha}^{N-1} &\big(g_{\gamma,\alpha}\rho_\gamma(k)\,\rho_\alpha(k+1) + g_{\alpha,\gamma}\rho_\alpha(k-1)\,\rho_\gamma(k) \\ &- g_{\gamma,\alpha}\rho_\alpha(k)\,\rho_\gamma(k+1) - g_{\alpha,\gamma}\rho_\gamma(k-1)\,\rho_\alpha(k)\big)\ . \qquad (6.3)\end{aligned}$$

Für jeden Gitterplatz k gilt die zusätzliche Bedingung

$$\sum_{\alpha=0}^{N-1} \rho_\alpha(k) = 1\ . \qquad (6.4)$$

Dies folgt aus der Definition der Dichteoperatoren.

Speziell für die Raten (4.1) des Kondensationsmodells ergibt sich für die lokalen Dichten von "1"- und "2"-Teilchen

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_1(k) &= J_1^{k-1,k} - J_1^{k,k+1} \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_2(k) &= J_2^{k,k+1} - J_2^{k-1,k} \qquad k = 1,\ldots,L \qquad (6.5)\end{aligned}$$

mit den lokalen *mean-field*-Teilchenströmen

$$\begin{aligned}J_1^{k-1,k} &= \lambda\rho_1(k-1)\,\rho_0(k) + q\rho_1(k-1)\,\rho_2(k) - \rho_2(k-1)\,\rho_1(k) \\ J_2^{k-1,k} &= \lambda\rho_0(k-1)\,\rho_2(k) + q\rho_1(k-1)\,\rho_2(k) - \rho_2(k-1)\,\rho_1(k) \qquad (6.6)\end{aligned}$$

zwischen den Gitterplätzen $k-1$ und k, siehe auch (4.16). Der Strom der "1"-Teilchen fließt nach rechts (d.h. in Richtung wachsender Indizes), derjeniger der "2"-Teilchen in umgekehrter Richtung.

Durch die *mean-field*-Näherung reduziert sich die Mastergleichung auf ein System von $(N-1)L$ gekoppelten Differentialgleichungen, die aber im Gegensatz zur Mastergleichung nichtlinear sind. Diese Gleichungen beschreiben die Dichteprofile $\rho_\alpha(k)$. Vernachlässigt man neben (6.2) auch alle weiteren Korrelationen, so erhält man die stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_s(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_L) = \prod_{k=1}^{L} \rho_{\beta_k} \ . \tag{6.7}$$

Man erkennt sofort, daß die homogene Dichteverteilung $\rho_\alpha(k) = \rho_\alpha$ für alle Teilchendichten ρ_α eine stationäre Lösung des Gleichungssystems (6.5) ist, also $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_\alpha(k) = 0$ erfüllt. Dies ist eine Folge der Periodizität und der räumlichen Homogenität des Systems. Ein vollständig symmetrischer stationärer Zustand (vgl. Abschnitt 4.1) ist äquivalent zu einer exakt gültigen homogenen Lösung der *mean-field*-Gleichungen.
Die nichtlinearen Gleichungen (6.5) lassen aber für das Kondensationsmodell auch weitere, inhomogene stationäre Lösungen zu. Diese findet man, wenn man die Gleichungen für vorgegebene Gitterlänge und Raten numerisch integriert und dabei von genügend inhomogenen Anfangsbedingungen ausgeht (einen Hinweis darauf erhielt ich von C. Godrèche [52]). Dazu wird die Zeitentwicklung (6.5) in Zeitschritte Δt diskretisiert*. In jedem Zeitschritt werden alle Gitterplätze gleichzeitig gemäß

$$\begin{aligned} \rho_1(k) &\mapsto \rho_1 + (J_1^{k-1,k} - J_1^{k,k+1})\Delta t \\ \rho_2(k) &\mapsto \rho_2 + (J_2^{k,k+1} - J_2^{k-1,k})\Delta t \end{aligned} \tag{6.8}$$

geändert. Dies iteriert man solange, bis die Ströme $J_1^{k-1,k}$ und $J_2^{k-1,k}$ in genügender Näherung unabhängig von k geworden sind, was einen stationären Zustand bedeutet. Für die meisten Ergebnisse ergibt eine relative Abweichung von 10^{-6} eine ausreichende Präzision.
Inhomogene Lösungen findet man zum einen in der reinen Phase, d.h. für $q < 1$, beliebige λ, ρ_1 und ρ_2 (siehe Kapitel 8), zum anderen existieren sie auch in der gemischten Phase (siehe auch Kapitel 9, wo sie für makroskopische Abstände näherungsweise berechnet werden). In der ungeordneten Phase entwickelt sich aus beliebigen Anfangsbedingungen immer ein homogener stationärer Zustand. Die *mean-field*-Vorhersage für die Phasengrenze zwischen ungeordneter und gemischter Phase wird in Abschnitt 9.3 berechnet und mit Ergebnissen von Simulationen und Rechnungen im großkanonischen Ensemble verglichen werden. Die Dichteprofile und Zweipunktkorrelationsfunktionen, die in der *mean-field*-Näherung bestimmt werden, stimmen für makroskopische Abstände gut mit den Ergebnissen der Monte-Carlo-Simulationen überein (vgl. Abschnitt 9.2). Dies gilt auch für den Strom in der gemischten Phase (inhomogene Lösungen), nicht jedoch in der ungeordneten Phase (homogene Lösungen), siehe Kapitel 7.
Im Unterschied zur stationären Lösung der Mastergleichung ist bei stationären Lösungen der *mean-field*-Gleichungen die Translationssymmetrie immer dann gebrochen, wenn inhomogene Profile auftreten, also auch für endliche Gitter und in der gemischten Phase.

* Im Gegensatz zur Mastergleichung muß man zur numerischen Lösung der *mean-field*-Gleichungen nicht auf Monte-Carlo-Simulationen zurückgreifen.

7. Der Teilchenstrom im Kondensationsmodell

Dieses Kapitel beschreibt die Ergebnisse, die mit Monte-Carlo-Simulationen (Kapitel 5), *mean-field*-Berechnungen (Kapitel 6) und der algebraischen Matrixproduktmethode (kanonisches und großkanonisches Ensemble, Abschnitte 4.1 und 4.2) für die Teilchenströme des Kondensationsmodells gewonnen wurden. Der Strom liefert einen ersten, wichtigen Hinweis auf die Phasenstruktur des Modells.
Die Dichte der positiven Teilchen sei $\rho_1 = p$, die der negativen $\rho_2 = m$ und die der Löcher $v = 1 - p - m$. Wenn die Teilchendichten, wie es oft der Fall sein wird, gleich sind, gilt die Bezeichnung

$$\rho := p = m \tag{7.1}$$

und das Modell ist CP-invariant. In diesem Fall ist

$$J := J_+ = J_- \ , \tag{7.2}$$

so daß bei Monte-Carlo-Ergebnissen zur Verbesserung der Statistik der Mittelwert von positivem und negativem Teilchenstrom gebildet werden kann.
Beispielhaft sollen die Ergebnisse der Simulationen und der algebraischen Methode in einigen Abbildungen gezeigt werden. Die Ergebnisse basieren jedoch auf wesentlich mehr als den Daten, die hier angeführt werden können.
In Abbildung 4 wird – für festes $\lambda = 1$ und zwei verschiedene Dichten $\rho = 0.2$ und $\rho = 0.4$ – die Abhängigkeit des Stroms von q dargestellt. Man erkennt, daß in einem Bereich $J = (q-1)/4$ gilt (dies ist die Gerade (c) in Bild 4). Abbildung 5 zeigt den Strom geteilt durch diesen Wert für verschiedene λ in Abhängigkeit von q bei fester Dichte $\rho = 0.2$. Man erkennt wiederum, daß in einem Teilbereich zwischen $q = 1$ und einem von λ abhängigen Wert q_c der Strom durch $J = (q-1)/4$ gegeben ist.
Die gezeigten Ströme gelten im thermodynamischen Limes $L \to \infty$. Sie wurden aus den Ergebnissen der algebraischen Matrixproduktmethode für das großkanonische Ensemble (Abschnitt 4.2) gewonnen, indem die Werte für endliche Gitter (bis zu $L = 300$) mit dem Bulirsch-Stoer-Algorithmus extrapoliert wurden [49]. Diese Werte wurden für alle q mit umfangreichen Monte-Carlo-Simulationen (bis zu $L = 1000$) überprüft. Aus diesen Daten läßt sich der thermodynamische Limes nicht extrapolieren, da die Ergebnisse nicht nur mit numerischen, sondern auch mit statistischen Ungenauigkeiten behaftet sind.
Aus Gleichung (6.6) erhält man für eine homogene *mean-field*-Lösung

$$\begin{aligned} J_+ &= \lambda p v + (q-1) p m \\ J_- &= \lambda m v + (q-1) p m \ . \end{aligned} \tag{7.3}$$

Vergleicht man dies mit dem tatsächlich gemessenen Strom, so sieht man, daß lokale Korrelationen bzw. die Bildung nichthomogener Muster für das Kondensationsmodell eine Rolle spielen müssen. In der ungeordneten Phase weicht für $q \to \infty$ der *mean-field*-Strom zunehmend vom richtigen Wert ab*.
Die Linien (a) und (b) in Abbildung 4 geben die *mean-field*-Ströme (7.3) wieder. Man erkennt zweierlei: Erstens ergibt (7.3) für $q = 3$ und $\lambda = 1$ den korrekten Strom. Dies ist keine Überraschung, da für diese Parameter eine eindimensionale Darstellung der quadratischen

* Dort existiert nur eine homogene stationäre Lösung.

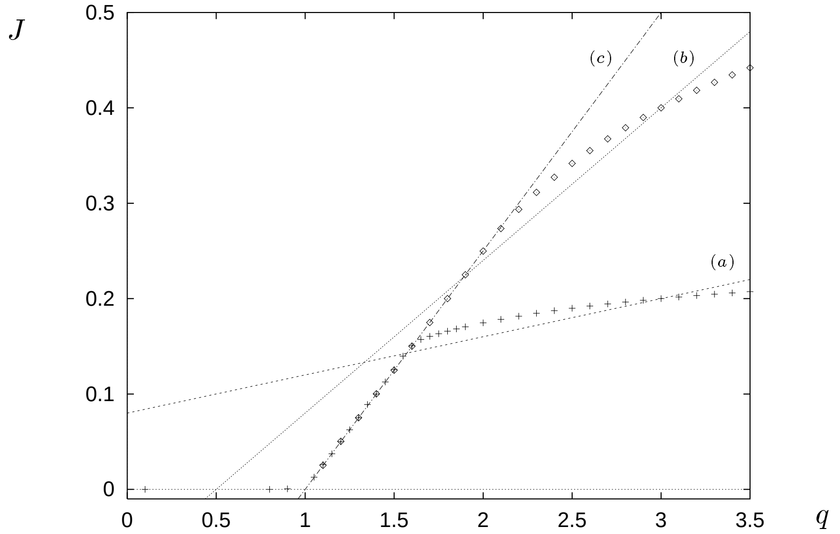

Abbildung 4. Die q-Abhängigkeit von J für $\lambda = 1$ und für zwei verschiedene Dichten $\rho = 0.2$ (+) und $\rho = 0.4$ ($\diamond$). Entsprechende *mean-field*-Ströme sind durch (a) bzw. (b) gegeben. Die Gerade (c) entspricht Gl.(7.4). Die Werte sind extrapoliert für $L \to \infty$.

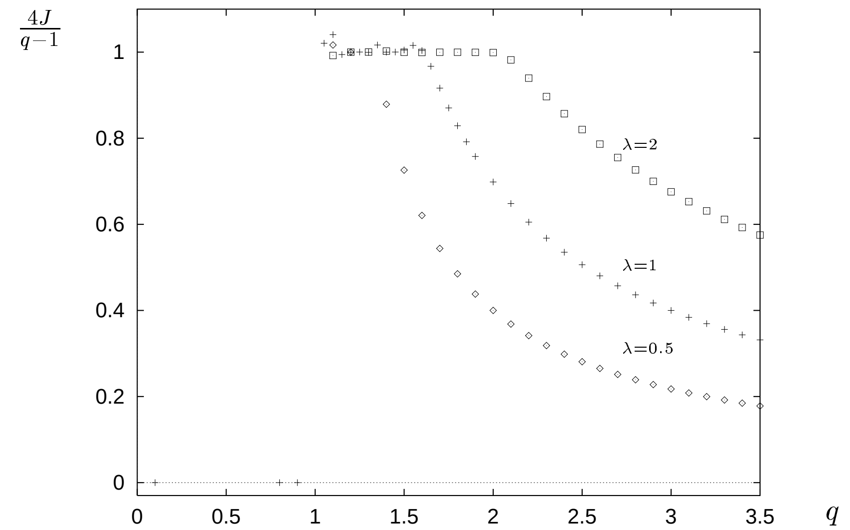

Abbildung 5. Die q-Abhängigkeit von $4J/(q-1)$ für $\rho = 0.2$ und drei Werte von $\lambda = 0.5, 1$ und 2. Die Werte sind extrapoliert für $L \to \infty$.

Algebra (4.2) existiert, siehe Gleichung (4.11). Andererseits gibt es einen zweiten Punkt, an dem die homogene *mean-field*-Näherung den Strom richtig vorhersagt. Dieser Punkt ist nicht mit einer exakten Gültigkeit der *mean-field*-Theorie verbunden. Er liegt bei dem maximalen $q = q_c$, für das $J = (q-1)/4$ ist. Diese bemerkenswerte Eigenschaft wird für die Formulierung eines Modells der gemischten Phase von Nutzen sein (siehe Kapitel 9).
In den Abbildungen 4 und 5 kann man drei verschiedene Bereiche unterscheiden, die, wie später zu zeigen sein wird, als Phasen anzusehen sind. Die Ergebnisse aus diesen Bildern und weiteren Daten zusammenfassend, erhält man für den Strom im thermodynamischen Limes:

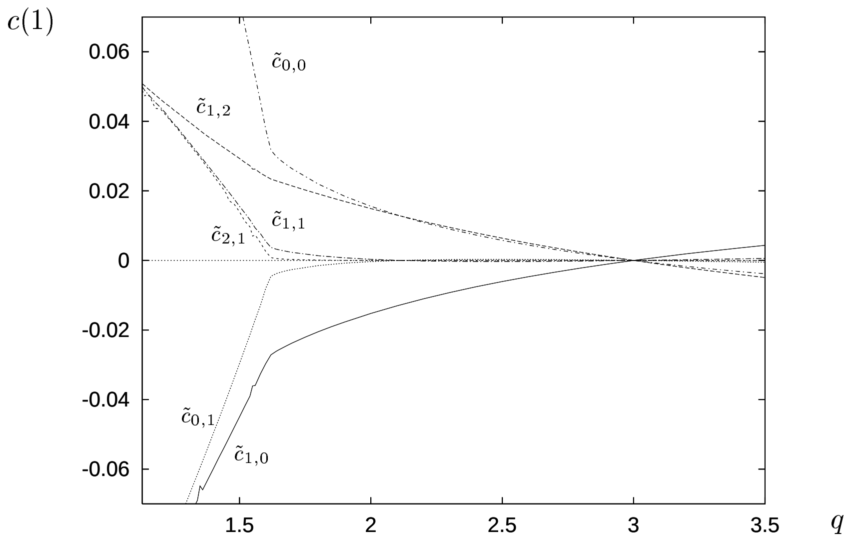

Abbildung 6. Korrelationsfunktionen (7.5) für benachbarte Gitterplätze, $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$ und extrapoliert für $L \to \infty$ (großkanonisches Ensemble).

a) Für $0 < q < 1$, λ und ρ beliebig: Strom $J = 0$ (reine Phase)

b) Für $1 \leq q < q_c$ (gemischte Phase):

$$J = \frac{q-1}{4} \tag{7.4}$$

Dies gilt allgemein für alle untersuchten Dichten ρ und unabhängig von λ!* Der Wert von q_c ist hingegen von ρ und λ abhängig. Er steigt mit zunehmender Dichte und mit zunehmendem λ.

c) Für $q \geq q_c$: Strom J ist von ρ, λ und q abhängig (ungeordnete Phase). Für große Werte von q wird J in linearer Ordnung in q^{-1} in Abschnitt 4.3 analytisch berechnet. (Gleichungen (4.48), (4.54) und (4.57)).

In Kapitel 9 wird das Phasendiagramm des Kondensationsmodells näher bestimmt werden; die für q_c gemessenen Werte sind dort tabelliert.
Die Universalität des Stroms (7.4) ist ein sehr unerwartetes Ergebnis, das an Phänomene wie Superfluidität erinnert. Im Laufe der folgenden Kapitel wird klar werden, daß diese Analogie noch auf weitere Aspekte ausgedehnt werden kann. Auch die Namen, die hier für die drei Phasen vergeben wurden, werden näher begründet. Die Teilchen sind offensichtlich in der Lage, innerhalb gewisser Grenzen unabhängig von λ und ihrer Dichte ρ einen stationären Zustand einzunehmen, der sich stets so formiert, daß er immer den gleichen Strom von Teilchen zuläßt. Dieser kollektive Effekt hat nichttriviale Ursachen, was sich auch daran erkennen läßt, daß er exakt erst im thermodynamischen Limes $L \to \infty$ gültig ist. Für endliche Gitter “merkt” der Strom etwas von der Gesamtdichte der Teilchen.
In den Abbildungen 4 und 5 erkennt man, daß die Ableitung des Stroms nach q bei q_c nicht stetig ist. Abbildung 6 zeigt nun alle lokalen Korrelationen mit Abstand 1 für $\lambda = 1$ und $\rho = 0.2$. Der Strom ist eine bestimmte Kombination solcher Größen. Es gilt aufgrund der CP-Symmetrie des Modells, daß $c_{1,0} = c_{0,2}$, $c_{0,1} = c_{2,0}$ und $c_{1,1} = c_{2,2}$ ist. Die Graphen zeigen

* Für $\lambda = 0$ verschwindet der Strom natürlich unabhängig von q.

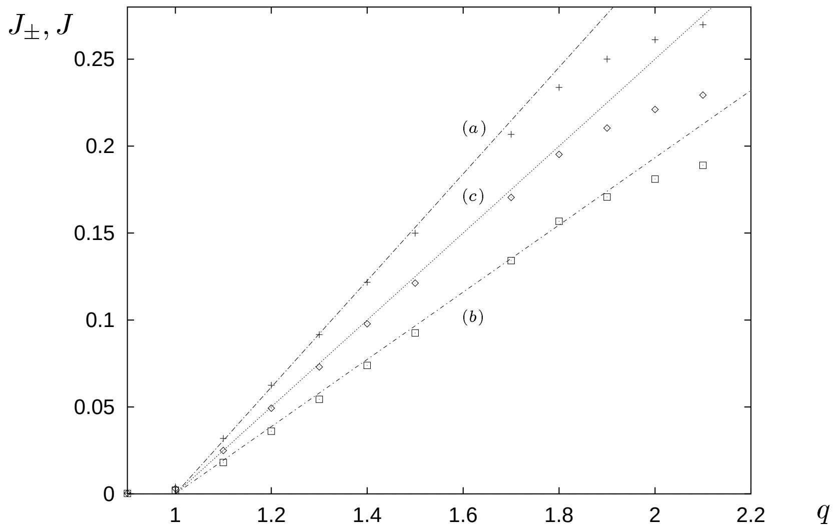

Abbildung 7. Die Ströme J_1, J_2 und ihr Mittelwert J als Funktionen von q für $\lambda = 1$, $p = 0.4$, $m = 0.2$ und $L = 800$ (Monte-Carlo-Simulation). Die Geraden (a) und (b) werden durch Gl.(7.6) mit $\eta = 0.23$ gegeben, die Gerade (c) durch Gl.(7.4).

Werte von

$$\tilde{c}_{\alpha,\beta}(R) := c_{\alpha,\beta}(R) - \rho_\alpha \rho_\beta \tag{7.5}$$

mit $R = 1$ aufgetragen gegen q, vgl. (4.36). Die Werte für endliche Gitterlängen (bis zu $L = 150$) wurden mit der Matrixproduktmethode berechnet (großkanonisches Ensemble, vgl. (4.37)) und für $L \to \infty$ extrapoliert. Für einen vollständig symmetrischen stationären Zustand sind die Korrelationsfunktionen (7.5) null. Man erkennt, daß die Ableitungen aller Kurven von Abbildung 6 bei einem Wert $q = q_c$ eine Unstetigkeit aufweisen. Diese Stelle läßt sich mit dem Phasenübergang von gemischter zu ungeordneter Phase identifizieren (vgl. die folgenden Kapitel) und ermöglicht die präziseste Messung des kritischen Punkts. Man erhält $q_c = 1.62 \pm 0.05$ für $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$.

Bisher wurden nur Ergebnisse für den Fall von gleichen positiven und negativen Teilchendichten vorgestellt. Auch für $p \neq m$ wurden Simulationen des Modells durchgeführt, wenn auch in geringerem Umfang. Die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen lassen sich nur schwer extrapolieren. Daher werden im folgenden Resultate für große, aber endliche Gitterlängen diskutiert.
Abbildung 7 zeigt den Strom in Abhängigkeit von q für $p = 0.4$ und $m = 0.2$ bei $\lambda = 1$ und einer Gitterlänge $L = 800$. Es wurden auch weitere Werte von λ, p und m untersucht. Für $q < 1$ erhält man wieder einen verschwindenden Strom: Die reine Phase bleibt unverändert erhalten. In der gemischten Phase hat man verschieden große Ströme; da $p > m$, ist auch $J_+ > J_-$. Beide Ströme zeigen eine lineare Abhängigkeit von q. Berücksichtigt man auch die L-Abhängigkeit der Werte, so zeigt sich, daß die Ströme in der gemischten Phase in guter Näherung durch

$$J_\pm = \frac{q-1}{4}(1 \pm \eta) \tag{7.6}$$

parametrisiert werden können. Der Parameter η hängt von p, m und λ ab, vgl. Gleichung (9.20). Bemerkenswert ist nicht nur, daß beide Stromkurven beim gleichen Wert von q einen Knick haben, der den Übergang zur ungeordneten Phase markiert, sondern vor allem, daß ihr Mittelwert $J = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$ in der gemischten Phase wiederum durch den Ausdruck (7.4) gegeben ist (siehe Abbildung 7).
In den nächsten Kapiteln werden die drei Phasen im einzelnen untersucht werden. Unter vereinfachenden Annahmen wird es gelingen, die gemischte Phase zu beschreiben und den Übergang von der gemischten zur ungeordneten Phase zu bestimmen. Dies wird auch für ungleiche Dichten $p \neq m$ möglich sein.

Hier sollen abschließend noch einige Bemerkungen zur Abhängigkeit des Stroms von der Gitterlänge gemacht werden. Diese ist für kanonisches und großkanonisches Ensemble verschieden. Für eindimensionale Darstellungen (Bedingung (4.11)) lassen sich die Korrekturen endlicher Gitterlänge exakt bestimmen. Man wählt $G_0 = G_1 = G_2 = 1$. Für das kanonische Ensemble (Abschnitt 3.1) erhält man im Fall $\rho = p = m$

$$J = \lambda\rho(\frac{L}{L-1}) \ . \tag{7.7}$$

Im großkanonischen Ensemble (Abschnitt 3.2.1) findet man zunächst

$$z = z_1 = z_2 = \frac{\rho}{1-2\rho} \tag{7.8}$$

und damit

$$J = \lambda\rho \tag{7.9}$$

unabhängig von L (vgl. auch die Diskussion von Gleichung (4.32)).
Mit Monte-Carlo-Simulationen für das kanonische Ensemble und numerischer Berechnung des großkanonischen Ensembles mit der Matrixproduktmethode wurde das *finite-size*-Verhalten des Stroms in weiteren Fällen untersucht. Für das großkanonische Ensemble lassen sich folgende typische Ergebnisse angeben (alle Daten sind für $\lambda = 1$ und $\rho = 0.2$):

$$\begin{array}{lll} q = 0.8 & J = 0.09\exp(-0.055L) & \text{(reine Phase)} \\ q = 1.2 & J = 0.05 + 1.6/L & \text{(gemischte Phase)} \\ q = 2.2 & J = 0.18158 + 0.04/L^2 & \text{(ungeordnete Phase)} \\ q = 3.8 & J = 0.21065 - 0.016/L^2 & \text{(ungeordnete Phase)} \end{array} \tag{7.10}$$

Die letzten beiden Fälle unterscheiden sich darin, daß q einmal kleiner und einmal größer ist als der *mean-field*-Wert $q = 3$.
Im kanonischen Ensemble und insbesondere in der gemischten Phase ist die Bestimmung der Korrektur endlicher Gitterlängen schwierig, da große Korrekturterme auftreten. Um dies zu veranschaulichen, wird in Abbildung 8 für $\lambda = 1$, $q = 1.2$ und $\rho = 0.2$ die relative Abweichnung des Strom des kanonischen Ensembles von seinem Grenzwert $(q-1)/4$ gegen L aufgetragen. Man erkennt, daß die Konvergenz langsam und nicht gleichförmig ist, so daß die ebenfalls in diesem Bild gezeigten Ergebnisse der algebraischen Rechnung (bis zu $L = 30$, vgl. Abschnitt 4.1) bei einer Extrapolation ein falsches Resultat ergeben. Der physikalische Grund hierfür ist, daß sich für kleine Gitter noch kein Kondensat gebildet hat. Dies läßt sich bei Monte-Carlo-Simulationen beobachten. Die Länge, bei der die Kondensatbildung einsetzt,

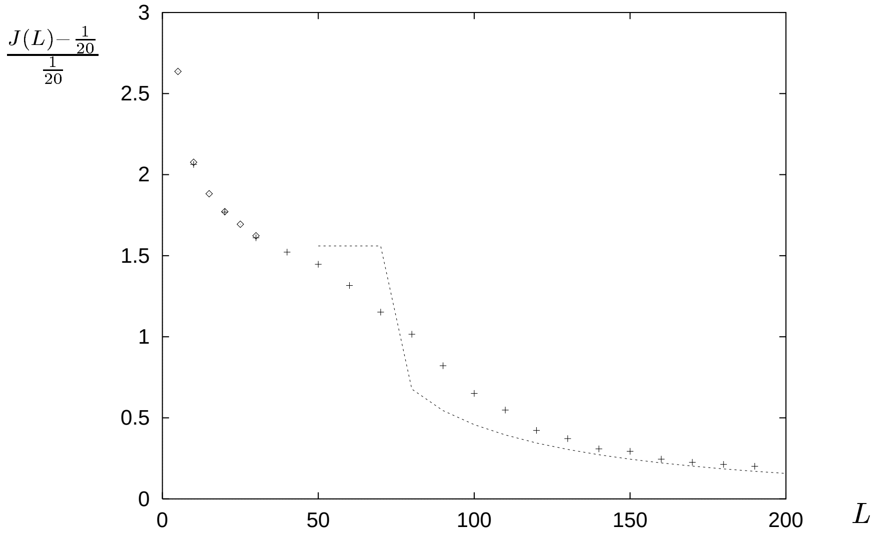

Abbildung 8. Konvergenz des Stroms zu seinem thermodynamischen Grenzwert 1/20 im kanonischen Ensemble für $q = 1.2$, $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$ (gemischte Phase): Monte-Carlo-Simulation (+) bis $L = 200$, algebraische Berechnung ($\diamond$) bis $L = 30$ im Vergleich mit *mean-field*-Werten.

ist eine Funktion der Parameter q und λ und der Dichte ρ. Für die Werte von Abbildung 8 liegt sie bei $L \approx 70$.
Die Monte-Carlo-Daten sind nur bis zu $L = 200$ aufgetragen. Ihre statistischen Ungenauigkeiten verhindern eine verläßliche Anwendung von Extrapolationsalgorithmen. Aus Simulationen bis zu $L = 1000$ gewinnt man dennoch eine zuverlässige Schätzung für den Grenzwert $L \to \infty$, jedoch gerade nicht für die in diesem Bereich bereits sehr kleinen Korrekturen. Aus den gemessenen Daten kann man unter diesen Vorbehalten auf eine algebraische Korrektur mit einem Exponenten zwei schließen.
Auch die *mean-field*-Gleichungen besitzen erst für große L eine inhomogene Lösung, was als Kondensatbildung interpretiert werden kann. Der Strom, der sich für die gemischte Phase aus den stationären Lösungen der *mean-field*-Gleichungen ist ebenfalls in Abbildung 8 verzeichnet *. Es ergeben sich Abweichungen vom *finite-size*-Verhalten des Stroms im kanonischen Ensemble, während der Grenzwert $L \to \infty$ richtig vorhergesagt wird. Für große L wird eine Abschätzung des *mean-field*-Stroms in Kapitel 9 berechnet. Für $1 < q < q_c$ findet man als Ergebnis für J den Ausdruck (9.13)) mit quadratischen Korrekturen, was mit den Simulationsergebnissen kompatibel ist.
Für $q = 1$ hingegen kann die Konvergenz des Stroms zum thermodynamischen Grenzwert im kanonischen Ensemble gut beobachtet werden. Man erhält aus den Monte-Carlo-Simulationen

$$\begin{aligned}
&\rho = 0.1,\ \lambda = q = 1: && J = 5/L \\
&\rho = 0.2,\ \lambda = q = 1: && J = 2.5/L \\
&\rho = 0.2,\ \lambda = 2,\ q = 1: && J = 2.5/L \\
&\rho = 0.4,\ \lambda = q = 1: && J = 1.25/L\ ,
\end{aligned} \tag{7.11}$$

* Für homogene Lösungen ist der Strom unabhängig von der Gitterlänge durch (7.3) gegeben.

was auf die allgemeine Regel $J(q = 1, \lambda) = 1/(2\rho L)$ schließen läßt. In Kapitel 9 wird dies anhand eines *mean-field*-Modells der gemischten Phase erklärt werden können (Gleichung 9.14). Der Punkt $q = 1$ gehört zur gemischten Phase.

8. Die reine Phase des Kondensationsmodells

Es wurde gezeigt, daß sich das Kondensationsmodell (4.1) für $q < 1$, beliebiges λ und beliebige Dichten p und m in einer Phase befindet, für die der Strom im thermodynamischen Grenzfall null ist. Die positiven und negativen Teilchen blockieren gegenseitig ihr Vorankommen.

8.1. Dichteprofil und Korrelationsfunktionen

Bei $q = 0$ reicht ein einziges negatives Teilchen, um alle positiven Teilchen zu blockieren, weshalb die Translationsinvarianz auch für endliche Systeme gebrochen ist. Bei einer endlichen Dichte von positiven und negativen Teilchen sind für $q = 0$ alle Zustände der Form

$$((0)\cdots(0)(+)\cdots(+)(-)\cdots(-)(0)\cdots(0)(+)\cdots(+)(-)\cdots(-)\cdots) \tag{8.1}$$

stationär.
Für $0 < q < 1$ und endliches L ist das System in jedem Teilchenzahlsektor ergodisch. Startet man von einer beliebigen Anfangskonfiguration, so organisieren sich die Teilchen schnell in Blöcke. Dabei reihen sie sich in der Folge (8.1) aneinander, da ein positives Teilchen nur auf einer Zeitskala $T \geq q^k$ durch eine Reihe von negativen Teilchen der Länge k hindurchgelangt⋆, während es eine Reihe von Löchern in $T \simeq k$ passiert. Analoges gilt für die negativen Teilchen. Kleinere Blöcke lösen sich dabei auch schneller auf als größere, bis sich die Teilchen in drei Blöcke der Form

$$((0)(0)\cdots(0)(+)(+)\cdots(+)(-)(-)\cdots(-)) \tag{8.2}$$

organisiert haben, die das ganze Gitter einnehmen. Natürlich ist durch (8.2) kein exakter stationärer Zustand gegeben, sondern nur eine typische Anordnung der Teilchen: Zum einen fluktuiert die Grenze zwischen positivem und negativem Teilchenblock, zum anderen gelangen (für endliche Gitter) Teilchen einer Sorte durchaus durch die der anderen Sorte hindurch, was dazu führt, daß sich die Blöcke bewegen, wie es auch die Ergodizität des Systems erfordert. All dies läßt sich gut in Abbildung 1 verfolgen.
Mit größerer Gitterlänge bilden sich jedoch drei zunehmend ortsfeste reine Blöcke, die einen relativen Anteil von ρ_α am Gitter einehmen, wobei "reiner Block" bedeutet, daß die Dichte der jeweiligen Teilchensorte im Limes $L \to \infty$ in einem makroskopischen Bereich gegen eins konvergiert. Die Dynamik wird im folgenden Abschnitt näher diskutiert werden.
In Abbildung 9 werden Korrelationsfunktionen für die reine Phase gezeigt. Der Graph enthält die Zweipunktfunktionen $c_{0,0}$ und $c_{1,2}$ (vgl. (4.36)) in Abhängigkeit vom makroskopischen Abstand

$$y = R/L \, , \tag{8.3}$$

wobei R der mikroskopische Abstand in Einheiten des Gitterabstands ist. Die Daten wurden mit Monte-Carlo-Simulationen erzeugt. Für jeden Wert von y konvergieren die Korrelationsfunktionen exponentiell zu ihrem thermodynamischen Limes. Dies erklärt, warum die Funktionen bereits für relativ kleine Gitterlängen ($L = 75$ und 100) gut übereinstimmen. Die Abrundung der Spitze der $c_{1,2}$ Korrelation und der Anstieg für $y \to 1$ sind Effekte endlicher Gitterlänge und verschwinden mit L.

⋆ Dies sieht man leicht ein, wenn man die Rate g_{21} vernachlässigt

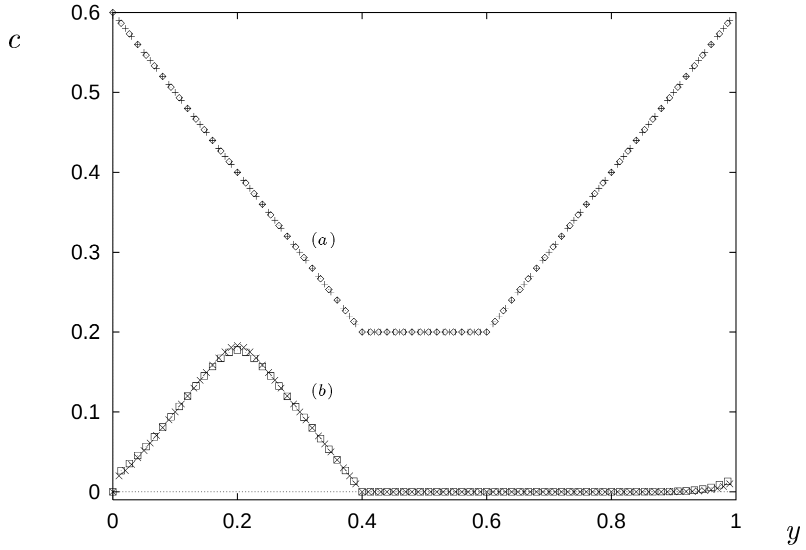

Abbildung 9. Die Korrelationsfunktionen $c_{0,0}$ (a) und $c_{1,2}$ (b) in der reinen Phase ($q = 0.5$, $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$, $L = 75$ und $L = 100$).

Die Korrelationen von Abbildung 9 können durch die Annahme dreier Blöcke (8.2) erklärt werden. Es wurde überprüft, daß dies auch für die anderen Korrelationsfunktionen gilt. Diese sind in der Abbildung nur aus Gründen besserer Übersichtlichkeit weggelassen. Die Korrelationsfunktion $c_{0,0}$ ist symmetrisch aufgrund der CP-Symmetrie des Modells.

8.2. Translationssymmetriebrechung

In der reinen Phase ist die Translationssymmetrie des Modells spontan gebrochen. Um dies zu zeigen, sollen nun dynamische Aspekte des Modells diskutiert werden.
Zur Messung der Inhomogenität der Teilchenverteilung auf dem Gitter wird ein entsprechender Ordnungsparameter benötigt. Dazu wurde die komplexe Größe

$$S(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_L) := \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{L} \exp(2\pi \mathrm{i} k/L) \delta(\beta_k) \tag{8.4}$$

gewählt, also die langreichweitige Fourierkomponente der Verteilung der Löcher auf dem Gitter. Zunächst stellt man fest, daß das Funktional

$$f(S) := - \lim_{L \to \infty} \log\left(\text{Wahrscheinlichkeit}(S, L)\right) \tag{8.5}$$

wohldefiniert ist, vgl. auch [22]. Dieses hat für die reine Phase Minima bei den Werten S mit $|S| = S_0$, wobei $S_0 = S_0(v)$ der maximal mögliche Betrag von S ist, der sich gerade dann ergibt, wenn sich alle Löcher in einer ununterbrochenen Reihe befinden. Für die gemischte Phase existiert ebenfalls ein Ring von Minima bei einem Wert $0 < |S| < S_0$. In der ungeordneten Phase besitzt das Funktional nur ein Minimum bei $S = 0$.
Mit Monte-Carlo-Simulationen läßt sich die Zeitabhängigkeit des Ordnungsparameters S und damit die Brechung der Translationsinvarianz untersuchen. Definiert man die Zeit T als diejenige, die das System benötigt, um von einem bestimmten Wert S mit minimalem $f(S)$

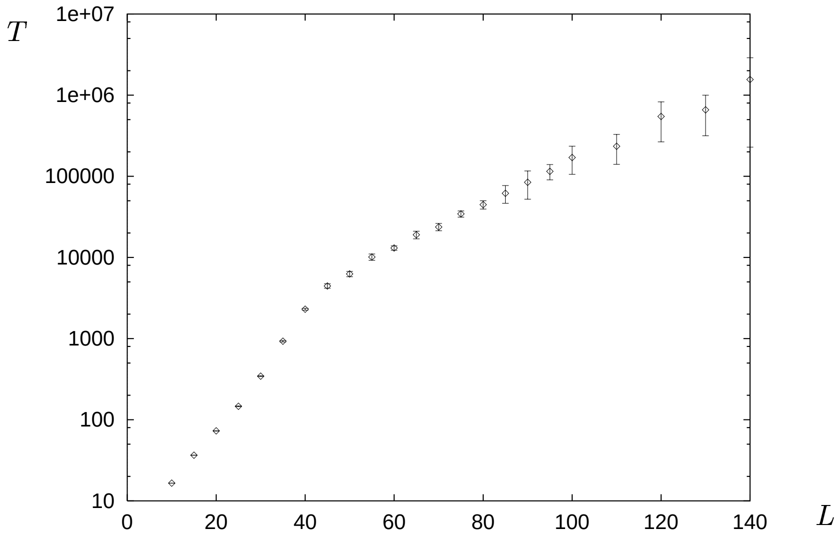

Abbildung 10. Die Übergangszeit T für $\rho = 0.2$, $q = 0.8$, $\lambda = 1$. Übergänge zwischen gegenüberliegenden Werten des Ordnungsparameters Gl. (8.4) werden mit Simulationen bestimmt.

zum Wert $-S^*$ zu gelangen (* bezeichnet komplexe Konjugation), so findet man für die reine Phase, daß für große L

$$\log(T) \propto L \tag{8.6}$$

gilt, vgl. Abbildung 10. Für große Gitter bewegen sich die Blöcke demnach nur noch auf einer Zeitskala, die exponentiell mit L wächst. Die Translationsinvarianz des Systems ist also in diesem dynamischen Sinn für $q < 1$ spontan gebrochen.
Aus anderen Arbeiten [38, 21, 25] ist bekannt, daß ein solches Verhalten der Übergangszeit damit einhergeht, daß sich Eigenwerte angeregter Zustände des Hamiltonoperators dem Grundzustandswert null exponentiell mit L nähern, so daß alle für $L \to \infty$ stationären Wahrscheinlichkeitsmaße, die extremal im Sinne von [38] sind, durch jeweils einen stationären Zustand gegeben werden. Analog sollte in der reinen Phase für $L \to \infty$ und jede Position auf dem Gitter ein stationärer Zustand existieren, bei dem der positive Block gerade bei dieser Position beginnt. Die Untersuchung der Eigenwerte des Hamiltonoperators ist jedoch aufgrund seiner großen Dimension so schwierig, daß diese Vermutung in dieser Arbeit nicht überprüft werden konnte.
Für die gemischte Phase findet man

$$T \propto L \ , \tag{8.7}$$

vgl. Abbildung 11. Die Translationsymmetrie ist demnach in dieser Phase nicht gebrochen. Das Kondensat fluktuiert räumlich und es existiert nur ein stationärer Zustand im thermodynamischen Limes.
Evans, Kafri, Koduvely und Mukamel heben in [26] ein Modell mit $N = 3$ untersucht, das einige Eigenschaften mit der reinen Phase des Modells dieser Arbeit gemeinsam hat. Es ist durch Diffusionsraten $g_{01} = g_{12} = g_{20} = 1$ und $g_{10} = g_{21} = g_{02} = q$ definiert. Der stationäre Zustand dieses Modells erfüllt für gleiche Dichten der drei Teilchensorten die Bedingung detaillierten

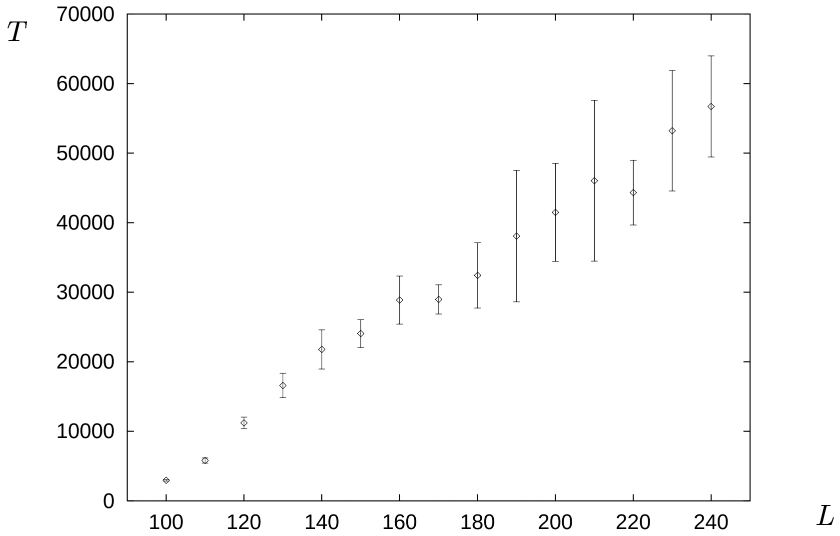

Abbildung 11. Die Übergangszeit T für $\rho = 0.2$, $q = 1.2$, $\lambda = 1$. Übergänge zwischen gegenüberliegenden Werten des Ordnungsparameters Gl. (8.4) werden mit Simulationen bestimmt.

Gleichgewichts. Damit läßt sich zeigen, daß dieses Modell eine räumliche Phasentrennung aufweist, ähnlich der reinen Phase des Kondensationsmodells. Auch für dieses Modell zeigt eine Diskusion von Zeitskalen, daß die Phasentrennung mit Translationssymmetriebrechung verbunden ist. Ein Phänomen analog zur Bose-Einstein-Kondensation (Kapitel 9 und 11) wird in dem Modell aus [26] jedoch nicht beobachtet.

9. Die gemischte Phase (Bose-Einstein-Kondensation)

Wie in Kapitel 10 gezeigt werden wird, muß zur Untersuchung der gemischten Phase mit Ausnahme des thermodynamischen Limes des Stroms das kanonische Ensemble verwendet werden.

9.1. Der thermodynamische Limes

Zunächst sei ein Überblick über die stationären Eigenschaften der gemischten Phase für $L \to \infty$ gegeben:
Im stationären Zustand der reinen Phase ($q < 1$, beliebiges λ und ρ) befinden sich die Teilchensorten in drei getrennten Blöcke (Kapitel 8). Am kritischen Punkt $q = 1$ sind die positiven und negativen Teilchen nicht mehr wie in der reinen Phase voneinander getrennt. Nur die Trennung zwischen Löchern und (positiven und negativen) Teilchen bleibt für $q = 1$ noch erhalten. In der gesamten gemischten Phase $1 \leq q < q_c$ bilden positive und negative Teilchen zusammen einen Block, der frei von Löchern ist, mischen sich aber untereinander in einer noch näher zu beschreibenden Weise. Daneben existiert für $1 < q < q_c$ auch eine makroskopische Zahl von Teilchen außerhalb dieses Blocks. Der kritische Punkt q_c ist von ρ und λ abhängig, und läßt sich anhand eines Modells bestimmen (Abschnitt 9.2).
Die Existenz makroskopischer Strukturen zeigt Abbildung 12: Dort ist zum einen die mittlere Länge aller nicht von Löchern unterbrochenen Teilchenketten (positive *oder* negative Teilchen) und zum anderen die mittlere Länge der längsten Teilchenkette des gesamten Gitters jeweils als Funktion von q aufgetragen*. Man erkennt, daß für $q < 1$ (reine Phase) alle Teilchen in einem Block versammelt sind: Die mittlere Länge der Teilchenketten ist gleich der Länge der längsten Kette und hat den Wert 2ρ. Für $1 < q < q_c$ ist die mittlere Länge der Ketten im thermodynamischen Limes null, während die längste Kette eine makroskopische Länge beibehält. Für $q > q_c$ existieren überhaupt keine makroskopischen Teilchenketten mehr. Der kritische Punkt q_c läßt sich im Prinzip aus den Kreuzungspunkten der Kurven verschiedener Gitterlänge in Abbildung 12 bestimmen.
Die gemischte Phase weist also eine räumliche Phasentrennung auf in einen Bereich, der keine Löcher enthält, und einen Bereich, der aus Löchern, positiven und negativen Teilchen besteht. Jener wird als Kondensat, dieser als fluide Phase bezeichnet werden. Der stationäre Zustand ist die gleichmäßige Überlagerung aller Zustände mit einer solchen Phasentrennung, die sich durch eine unterschiedliche Position des Kondensats unterscheiden (vgl. die Diskussion der Übergangszeiten in Abschnitt 8.2). Bei gleichen Teilchendichten $\rho = p = m$ ist die Teilchendichte in der fluiden Phase $\rho_\mathrm{f} = \rho_{\mathrm{f},1} = \rho_{\mathrm{f},2} < \rho$ und im Kondensat $\rho_\mathrm{k} = \rho_{\mathrm{k},1} = \rho_{\mathrm{k},2} > \rho$. Im Limes $L \to \infty$ bei festem $y = k/L$ (k sei der Gitterplatzindex) gilt für das Kondensat $\rho_\mathrm{k}(y) = 1/2$ und für die fluide Phase $\rho_\mathrm{f}(y) = \rho_\mathrm{f}$ jeweils unabhängig von der Position y. Dies ergibt sich aus Messungen und aus dem Modell von Abschnitt 9.2.
Die Universalität des Stroms $J = (q-1)/4$ läßt sich erklären, indem man annimmt, daß die zwei makroskopischen Bereiche der gemischten Phase den stationären Zuständen von Modellen mit offenen Randbedingungen entsprechen.
Das Kondensat, in dem keine Löcher vorhanden sind, hat dabei die Eigenschaften eines Diffusionsmodells mit zwei Zuständen je Gitterplatz ("1" und "2") und offenen Randbedingungen. Es gelten die asymmetrischen Diffusionsraten $g_{12} = q > g_{21} = 1$; die

* Diese Größen wurden mit Monte-Carlo-Simulationen bestimmt.

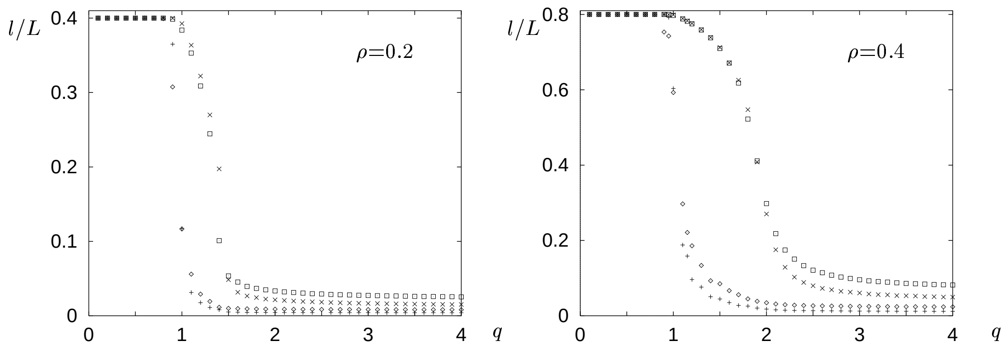

Abbildung 12. Mittlere Länge einer Kette von positiven oder negativen Teilchen in Einheiten der Gitterlänge ($L = 200(\diamond), 400(+)$) und längste Länge einer Teilchenkette ($L = 200(\Box), 400(\times)$) als Funktionen von q.

input- und *output*-Rate werden durch den Strom des periodischen Modells bestimmt*:

$$R_2^1 = L_1^2 = J/\rho_{\mathrm{f}} \tag{9.1}$$

Bei einer solchen Betrachtungsweise vernachlässigt man, daß die Ränder des Kondensats und seine Länge fluktuieren, sowie eventuell Korrelationen zwischen *input* und *output* vorhanden sind, die daher stammen, daß dieselben Teilchen, die das Kondensat verlassen, nach einer bestimmten Zeit am anderen Ende wieder als *input* erscheinen.
Es zeigt sich, daß die Raten (9.1) für $q < q_c$ immer so groß sind, daß sich das Zweizustandsmodell mit offenen Rändern in der *power-law*-Phase befindet, die durch einen Strom $J = (q-1)/4$ und eine Dichte $\rho = 1/2$ bei makroskopischem Abstand von den Rändern charakterisiert ist (vgl. [9], wo für dieses Modell der stationäre Zustand mit der Matrixproduktmethode algebraisch bestimmt wurde). Dies stimmt mit den Resultaten für das Kondensat überein und erklärt den universellen Ausdruck für den Strom. Man erwartet von diesem Modell wie im Fall vollständig asymmetrischer Diffusionsraten algebraische Profile und Korrelationsfunktionen.
Den fluiden Anteil des Gitters kann man analog als Dreizustandsmodell mit offenen Rändern auffassen, wobei die Diffusionsraten durch (4.1) und die Randraten durch (9.1) gegeben sind. Dieses Modell läßt sich für spezielle Parameter ebenfalls mit der Matrixproduktmethode behandeln. Die Existenz der entsprechenden Algebra wurde in [40] bewiesen. Anhand der Kenntnis der Physik des Kondensationsmodells kann man nun vorhersagen, daß das Dreizustandsmodell mit offenen Randbedingungen eine Phase besitzt, in der der Strom universell, d.h. unabhängig von λ und ρ allein durch q bestimmt ist. Nur in diesem Fall passen die beiden Modelle mit offenen Randbedingungen so zusammen, daß sie die gemischte Phase des Kondensationsmodells beschreiben können.
Eine Zerlegung des Kondensationsmodells in zwei Modelle mit offenen Randbedingungen ist nur für die gemischte Phase sinnvoll. Sie erklärt auch nicht die Existenz eines Kondensats, sondern nur seine (universellen) Eigenschaften. Das Auftreten des Kondensationsphänomens selbst bleibt ungeklärt.

* Die Dichten von positiven und negativen Teilchen seien gleich.

Es zeigt sich, daß für gleiche Teilchendichten Korrelationsfunktionen bei makroskopischen Abständen sowie der Strom gut durch die Annahme stationärer *mean-field*-Lösungen (6.7) für Kondensat und fluide Phase bestimmt werden können. Es seien q, λ, Gesamtteilchendichten $\rho = p = m$ und großes, aber endliches L fest vorgegeben. Wir betrachten Größen in Abhängigkeit von der makroskopischen Position $y = k/L$.

a) fluide Phase:
Die Länge des Kondensats sei $a = a(L)$. Die Dichte in der fluiden Phase ist für "1"- und "2"-Teilchen gleich:

$$\rho_\mathrm{f} = \rho_{\mathrm{f},1} = \rho_{\mathrm{f},2} \tag{9.2}$$

Für die fluide Phase kann eine homogene *mean-field*-Lösung angenommen werden, denn man erkennt anhand der Simulationsergebnisse, daß das Dichteprofil ungefähr konstant ist. Damit erhält man für den Strom $J(L)$ den Ausdruck

$$\lambda \rho_\mathrm{f}(1-\rho_\mathrm{f}) + (q-1)\rho_\mathrm{f}^2 = J \tag{9.3}$$

mit $\rho_\mathrm{f} = \rho_\mathrm{f}(L)$ gegeben durch

$$\frac{1}{2}a + (1-a)\rho_\mathrm{f} = \rho \ , \tag{9.4}$$

wobei der erste Term den Beitrag des Kondensats zur Dichte beschreibt, der durch die CP-Symmetrie und die Bedingung, daß im Kondensat keine Löcher existieren, festgelegt ist, und der zweite Term den Beitrag der fluiden Phase.

Aus (9.3) folgt, daß die Dichte in der fluiden Phase unabhängig von der Gesamtdichte auf dem Gitter ist, was durch Simulationen bestätigt wird. Wie bei einer Bose-Einstein-Kondensation bilden alle "zusätzlichen" Teilchen das Kondensat.

b) Kondensat:
Im Kondensat ist die Dichte nicht homogen, wie man aus Simulationen und numerischer Integration der *mean-field*-Gleichungen ersieht. Als Modellansatz seien daher inhomogene mean-field-Lösung $\rho_{\mathrm{k},1}(j)$ und $\rho_{\mathrm{k},2}(j)$ für die stationären Profile innerhalb des Kondensats gewählt. Es gilt

$$\rho_{\mathrm{k},1}(j) + \rho_{\mathrm{k},2}(j) = 1 \tag{9.5}$$

für alle Gitterpunkte j, die zum Kondensat gehören*. Nähert man die Profile endlicher Gitterlänge durch stetige Funktionen $\rho_{\mathrm{k},1}(y)$ und $\rho_{\mathrm{k},2}(y)$ mit der makroskopischen Position $y = j/L$, so ergibt sich durch Mittelung über den Strom rechts und links einer Position y aus den diskreten *mean-field*-Gleichungen

$$\frac{q}{2}[\rho_{\mathrm{k},1}(y-\frac{1}{L})\rho_{\mathrm{k},2}(y) + \rho_{\mathrm{k},1}(y)\rho_{\mathrm{k},2}(y+\frac{1}{L})] - \frac{1}{2}[\rho_{\mathrm{k},2}(y)\rho_{\mathrm{k},1}(y) + \rho_{\mathrm{k},2}(y)\rho_{\mathrm{k},1}(y+\frac{1}{L})] = J \ .$$

Damit und mit (9.5) erhält man durch lineare Entwicklung von ρ_k um y

$$(q-1)\rho_{\mathrm{k},1}(y)(1-\rho_{\mathrm{k},1}(y)) - \frac{q+1}{L}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\rho_{\mathrm{k},1}(y) = J \ . \tag{9.6}$$

* In der *mean-field*-Theorie ist das Kondensat in der gemischten Phase für alle Gitterlängen ortsfest, vgl. Kapitel 6.

Die räumliche Koordinate sei so gewählt, daß die Mitte des Kondensats bei $y = 0$ liegt. Gesucht sind CP-symmetrische Lösungen für $\rho_{\mathrm{k},1}(y)$ und $\rho_{\mathrm{k},2}(y)$, so daß man für $q > 1$

$$\begin{aligned} \rho_{\mathrm{k},1}(y) &= \frac{1}{2} - A\tan(By) \qquad\qquad \rho_{\mathrm{k},2}(y) = \frac{1}{2} + A\tan(By) \\ A &= \sqrt{\frac{J}{q-1} - \frac{1}{4}} \\ B &= \frac{2L\sqrt{(q-1)(J-\frac{q-1}{4})}}{q+1} \end{aligned} \tag{9.7}$$

erhält. Für $q = 1$ findet man hingegen ein lineares Profil

$$\rho_{\mathrm{k},1}(y) = \frac{1}{2} - \frac{1-2\rho}{a(1-a)}y \qquad\qquad \rho_{\mathrm{k},2}(y) = \frac{1}{2} + \frac{1-2\rho}{a(1-a)}y \tag{9.8}$$

mit der Länge des Kondensats $a(L)$. Numerische Integration der *mean-field*-Gleichungen endlicher Gitterlänge (vgl. Kapitel 6) und Simulationen zeigen, daß das Dichteprofil des Kondensats im makroskopischen Limes nur an einem Ende stetig in das flache Profil der fluiden Phase übergeht. Daraus ergibt sich die Bedingung

$$\rho_{\mathrm{k},1}(\frac{a}{2}) = \rho_{\mathrm{k},2}(-\frac{a}{2}) = \rho_{\mathrm{f}} \ . \tag{9.9}$$

Im Fall $q > 1$ ergeben sich aus (9.3), (9.4), (9.7) und (9.9) vier Bestimmungsgleichungen

$$\begin{aligned} A &= \frac{1-2\rho}{2(1-a)\tan\left(\frac{Ba}{2}\right)} \\ B &= \frac{2L(q-1)}{q+1}A \\ A &= \sqrt{\frac{J}{q-1} - \frac{1}{4}} \\ J(1-a)^2 &= (q-1)(\rho - \frac{a}{2})^2 + \lambda(\rho - \frac{a}{2})(1-2\rho) \end{aligned} \tag{9.10}$$

für die vier Größen a, J, A und B, die in dem *mean-field*-Modell zur Beschreibung der gemischten Phase verwendet werden. Durch Entwicklung nach L findet man:

$$\begin{aligned} a_\infty &= \frac{2\rho(2\lambda - q + 1) - q + 1}{2(\lambda - q + 1)} \\ a &= a_\infty - \frac{\pi^2\,(q+1)^2\,(1-a_\infty)^2}{2a_\infty{}^2\,(1+\lambda-q)(q-1)(1-2\rho)}L^{-2} + \ldots \end{aligned} \tag{9.11}$$

$$\begin{aligned} A &= \frac{\pi(q+1)}{2a_\infty\,(q-1)}L^{-1} - \frac{\pi(1-a_\infty)(q+1)^2}{a_\infty{}^2\,(q-1)^2\,(1-2\rho)}L^{-2} + \ldots \\ B &= \frac{2L(q-1)}{q+1}A \end{aligned} \tag{9.12}$$

$$J = \frac{q-1}{4} + \frac{\pi^2(q+1)^2}{4a_\infty{}^2\,(q-1)}L^{-2} - \frac{(1-a_\infty)\,\pi^2\,(q+1)^3}{a_\infty{}^3\,(q-1)^2\,(1-2\rho)}L^{-3} + \ldots \tag{9.13}$$

Dabei geht man von dem bekannten thermodynamischen Limes $J = (q-1)/4$ aus. Man erkennt hieraus beispielsweise, daß das Kondensat für endliches L einen geringeren Anteil des Gitters einnimmt als im thermodynamischen Limes, wie es auch bei Simulationen beobachtet wird.

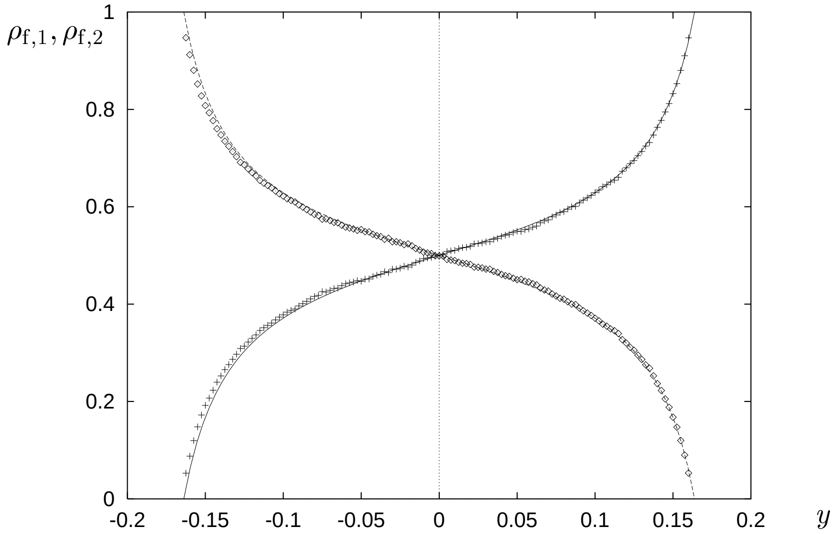

Abbildung 13. Dichteprofile innerhalb des Kondensats für $q = 1.2$, $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$ und $L = 400$: Monte-Carlo-Simulation und *mean-field*-Modell.

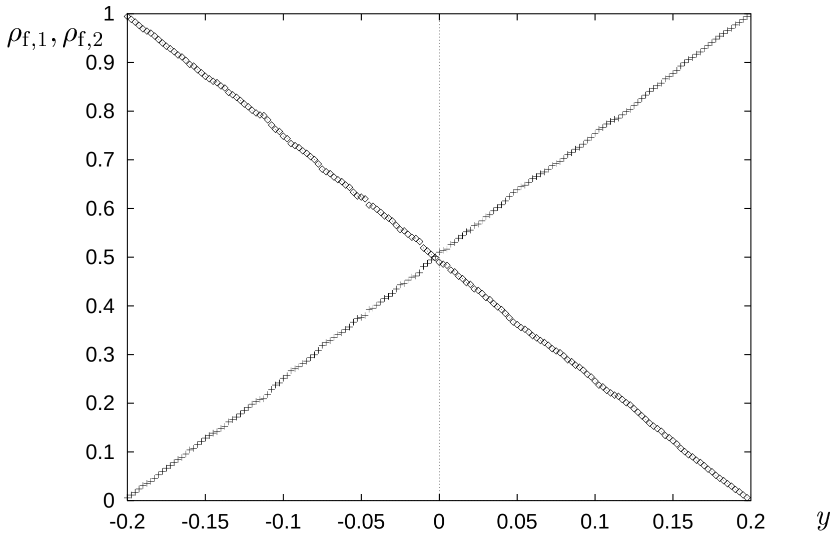

Abbildung 14. Lineare Dichteprofile innerhalb des Kondensats für $q = 1$, $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$ und $L = 400$: Monte-Carlo-Simulation.

Für $q = 1$ findet man:

$$J = \frac{1 - 2\rho}{a(1 - a)L} \tag{9.14}$$

$$a = \rho + \sqrt{\rho^2 + \frac{2(\rho - 1)}{\lambda L} + \frac{1}{\lambda^2 L^2}} + \frac{1}{\lambda L} = 2\rho - \frac{1 - 2\rho}{\rho\lambda} L^{-1} + \ldots \tag{9.15}$$

Alle Ergebnisse des Modells stimmen mit denen der Simulationen überein. Die Gleichungen (9.11)–(9.13) wurden zunächst direkt anhand des Stroms und der Form der Profile innerhalb und außerhalb des Kondensats überprüft. Das Profil innerhalb des Kondensats wurde

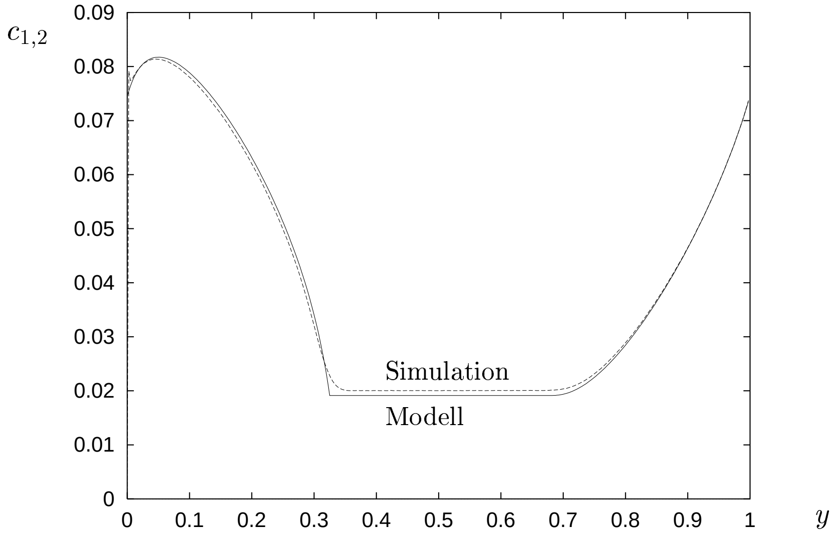

Abbildung 15. Die Korrelationsfunktion $c_{1,2}$ für $\rho = 0.2$, $q = 1.2$, $\lambda = 1$ und $L = 400$ (Monte-Carlo-Daten und *mean-field*-Modell mit $A = 0.118$ und $B = 8.13$).

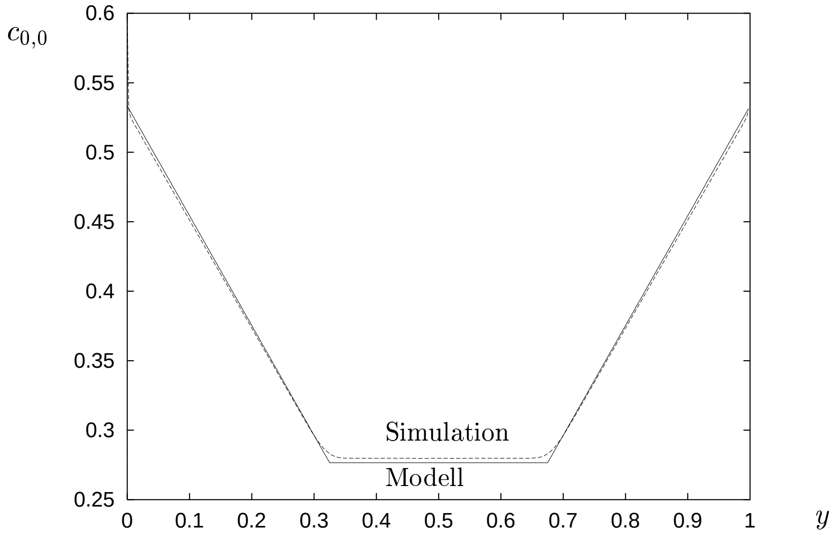

Abbildung 16. Die Korrelationsfunktion $c_{0,0}$ für $\rho = 0.2$, $q = 1.2$, $\lambda = 1$ und $L = 400$ (Monte-Carlo-Daten und *mean-field*-Modell mit $A = 0.118$ und $B = 8.13$).

bestimmt, indem die Verteilung der positiven und negativen Teilchen innerhalb der längsten Teilchenkette genau dann gemessen wurde, wenn diese die Länge a_∞ aufwies. Abbildung 13 zeigt, daß innerhalb des Kondensats für $1 < q < q_c$ das Dichteprofil mit sehr hoher Genauigkeit durch einen Tangens (vgl. (9.7)) beschrieben werden kann. Man findet bei $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$, $q = 1.2$ und $L = 400$ die Parameter $A = 0.118$ und $B = 8.13$, aus Gleichung (9.12) hingegen $A = 0.1075$ und $B = 7.825$, also eine Abweichung von etwa 10%. Als Strom findet man in der Simulation $J = 0.0530$, während aus (9.13) $J = 0.0522$ folgt. Für die Länge des Kondensats findet man mit Simulationen tatsächlich den Wert a_∞ aus (9.11) mit

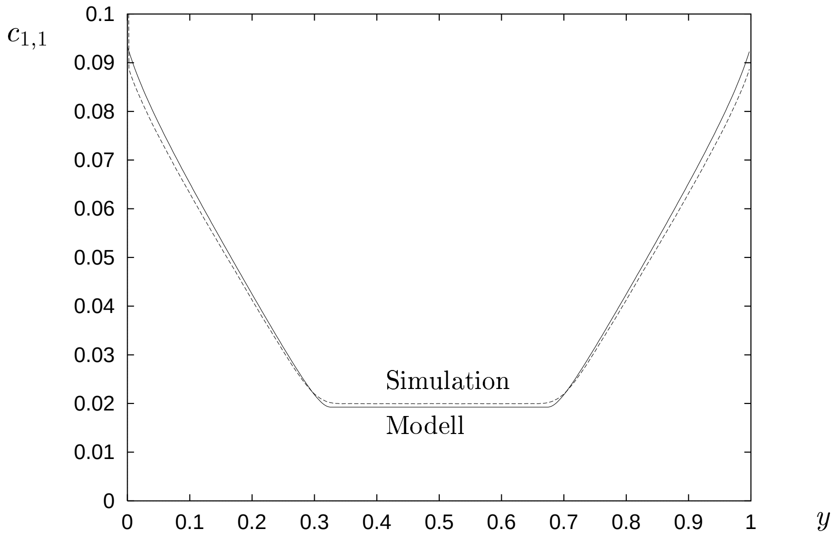

Abbildung 17. Die Korrelationsfunktion $c_{1,1}$ für $\rho = 0.2$, $q = 1.2$, $\lambda = 1$ und $L = 400$ (Monte-Carlo-Daten und *mean-field*-Modell mit $a = 0.118$ und $b = 8.13$).

quadratischen Korrekturen. Die Korrekturterme in (9.11), (9.12) und (9.13) sind für $L = 400$ noch relativ groß, weisen aber jeweils in die richtige Richtung, so daß erwartet werden kann, daß die Berücksichtigung höherer Ordnungen eine bessere Übereinstimmung ergibt.
Die oben diskutierte Korrespondenz zwischen Kondensat und Zweizustandsmodell mit offenen Randbedingungen gilt auch für endliche L. Für das Zweizustandsmodell erhält man ebenfalls ein Dichteprofil der Form (9.7). Dieses Ergebnis war bisher nicht bekannt. Für Raten entsprechend $q = 1.2$, $\lambda = 1$ und $\rho = 0.2$ und eine Kette mit offenen Randbedingungen der Länge $L' = a_\infty L = 130$ findet man aus dem Ergebnis einer Simulation $A = 0.117$ und $B = 8.13$ in guter Übereinstimmung mit den Werten für das Profil des Kondensats.
Für $q = 1$ ist das Dichteprofil innerhalb des Kondensats tatsächlich linear (siehe Abbildung 14). Der gemessene Strom wird durch (9.14) mit einer Genauigkeit von 0.5% beschrieben, was der Präzision der Monte-Carlo-Daten entspricht.
Nimmt man nun an, daß die gesamte Wahrscheinlichkeitsverteilung wie in Gleichung (6.7) durch die Profile festgelegt ist, so gibt das Modell auch die makroskopischen Korrelationsfunktionen vor. Alle Vorhersagen, die sich hieraus für die Korrelationsfunktionen $c_{\alpha,\beta}(y)$ (vgl. 4.36) ergeben, stimmen mit den Monte-Carlo-Daten gut überein, wie z.B. die Abbildungen 15, 16 und 17 zeigen. Dies gilt zumindest bei einem ausreichenden Abstand zum kritischen Punkt, vgl. den folgenden Abschnitt. Alle weiteren Korrelationsfunktionen lassen sich aus denen der drei Abbildungen errechnen, wenn man die CP-Symmetrie in Betracht zieht. Man erkennt, daß die Korrelationsfunktionen in der gemischten Phase eine andere Form haben als in der reinen Phase, jedoch in beiden Fällen makroskopische Strukturen existieren und die Korrelationslänge unendlich ist.

9.3. Der Phasenübergang von gemischter zu ungeordneter Phase

Für große L kann man aus der Bedingung $a = 0$, die bedeutet, daß das Kondensat

Tabelle 1. Der Phasenübergangspunkt q_c für verschiedene Dichten und verschiedene λ. Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen (q_c^{k}) und von Berechnung im großkanonischen Ensemble (q_c^{gk}). Fehler jeweils zwischen ± 0.05 für kleine ρ und λ und ± 0.3 für große ρ und λ. Zum Vergleich sind die Ergebnisse q_c^{M} (9.16) bzw. (9.19) des *mean-field*-Modells angegeben.

	$p=m=0.1$			$p=m=0.2$			$p=m=0.4$		
λ	q_c^{k}	q_c^{gk}	q_c^{M}	q_c^{k}	q_c^{gk}	q_c^{M}	q_c^{k}	q_c^{gk}	q_c^{M}
0.25		1.10	1.08	1.2	1.2	1.14		1.3	1.22
0.50		1.15	1.17	1.4	1.3	1.29	1.7	1.6	1.44
0.75		1.25	1.25	1.5	1.5	1.42		1.8	1.67
1.00	1.35	1.35	1.33	1.6	1.62	1.57	2.3	2.2	1.89
2.00		1.60	1.67	2.2	2.2	2.14	3.2	2.9	2.78
3.00		1.85	2.00	2.5	2.5	2.71		3.5	3.67
4.00		2.0	2.33	2.8	2.8	3.28		3.8	4.56
	$p=0.4,\ m=0.2$			$p=0.35,\ m=0.05$					
λ	q_c^{k}		q_c^{M}	q_c^{k}		q_c^{M}			
1.00	1.7		1.71	1.5		1.52			

verschwindet, errechnen, daß der kritische Punkt für das *mean-field*-Modell durch

$$q_c = \frac{2\rho(2\lambda+1)+1}{1+2\rho} - \epsilon(L) \tag{9.16}$$

mit

$$\epsilon^3 = -\frac{8\pi^2\lambda v(2-v+\lambda(1-v))^2}{(2-v)^6(1-v)} L^{-2} + \dots \tag{9.17}$$

gegeben ist, wenn $\rho = p = m$ ist (vgl. 9.11). Entsprechend findet man für $L \to \infty$ eine kritische Dichte ρ_c

$$\rho_c = \frac{q-1}{2(2\lambda - q + 1)} , \tag{9.18}$$

die dadurch definiert ist, daß für $\rho > \rho_c$ ein Kondensat existiert, während dies für $\rho < \rho_c$ nicht der Fall ist.
Für ungleiche Dichten $p \neq m$ gilt im thermodynamischen Limes $J_\pm = (q-1)(1\pm\eta)/4$, vgl. Gleichung (7.6). Damit und unter Annahme homogener *mean-field* Lösungen für $\rho_{\mathrm{f},1}$ und $\rho_{\mathrm{f},2}$ findet man

$$q_c = 1 + \frac{2(p+m)(1-p-m)\lambda}{1-4pm} . \tag{9.19}$$

Für den Parameter η gilt unter diesen Voraussetzungen

$$\eta = \frac{(p-m)(1-4pm)}{p+m} . \tag{9.20}$$

Anhand von Simulationen und algebraischer Berechnung im großkanonischen Ensemble läßt sich der kritische Wert $q_c(\lambda,\rho)$ dadurch abschätzen, daß man den Punkt bestimmt, an dem die Stromkurven $J(q)$ von $J = (q-1)/4$ abweichen und die lokalen Korrelationen eine nichtstetige Ableitung haben. Für das großkanonische Ensemble (Matrixproduktmethode) wird dabei der thermodynamische Limes des Stroms durch numerische Extrapolation bestimmt, für das kanonische Ensemble (Simulationen) muß er geschätzt werden. Die Fehler sind bei dieser Methode für große ρ und λ größer, da dort die Stromkurve am kritischen Wert q_c einen weniger stark ausgeprägten Knick besitzt. Für ungleiche positive und negative Teilchendichten wurde der Wert von q_c nur anhand von Simulationen bestimmt. Die Ergebnisse für q_c sind in Tabelle 1 zusammen mit den Modellvorhersagen (9.16) bzw. (9.19) aufgeführt. Sie stimmen bis auf wenige Ausnahmen innerhalb der Fehlergrenzen überein. Jedoch kann man aufgrund der Tendenz der Abweichungen vermuten, daß das Modell den kritischen Punkt nur für kleine ρ und λ korrekt vorhersagt.

10. Die ungeordnete Phase

In der ungeordneten Phase existieren keine makroskopischen Ketten von Teilchen, vgl. Abbildung 12.

Der Strom J_1 bzw. J_2 ist abhängig von q, λ, p und m. Für große q und $p = m = \rho$ wurde er in Abschnitt 4.3 analytisch berechnet. Im Gegensatz zur gemischten Phase (Abschnitt 9.2) ergibt die *mean-field*-Näherung des Stroms, die durch (7.3) gegeben ist, da in der ungeordneten Phase nur homogene Lösungen der *mean-field*-Gleichungen existieren, im allgemeinen nicht das richtige Ergebnis. Lokale Korrelationen spielen demnach eine Rolle, außer für diejenigen Parameterwerte, die (4.11) erfüllen und für die die homogene *mean-field*-Lösung exakt ist. Demnach ist die ungeordnete Phase auch verschieden vom fluiden Anteil der gemischten Phase.

In Abbildung (18) werden beispielhaft die Korrelationsfunktionen $c_{0,0}$, $c_{1,2}$ und $c_{1,1}$ für $q = 2.2$, $\lambda = 1$, $p = m = 0.2$ und $L = 100$ gezeigt. Aus diesen Korrelationen lassen sich alle anderen berechnen, da das Modell CP-symmetrisch ist. Die Korrelationslänge ist jeweils endlich, und der Wert für große Abstände ist durch den *mean-field*-Ausdruck $c_{\alpha,\beta} = \rho_\alpha \rho_\beta$ gegeben. Um das Verhalten der Korrelationslänge für $q \to q_c$ zu untersuchen, wurde aus dem exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktion $c_{1,2}$ jeweils die Korrelationslänge $\xi = \xi(L)$ bestimmt und zu ihrem Grenzwert für $L \to \infty$ extrapoliert. Dazu wurden für endliche Gitterlänge die Korrelationsfunktion im großkanonischen Ensemble exakt berechnet, vgl. Abschnitt 4.2. Die Ergebnisse für $\lambda = 1$ und $\rho = 0.2$ zeigt Abbildung 19. Man erkennt, daß die Korrelationslänge beim Übergang zur gemischten Phase divergiert. Der eingezeichnete Graph entspricht $1/\xi = 0.9\sqrt{q - q_c}$, woraus sich ein kritischer Exponent 1/2 ergeben würde. Allerdings sind die Fehler bei der Messung der Korrelationslänge und bei der Extrapolation groß.

Den algebraischen Abfall der Korrelationsfunktion $c_{1,2}$ am kritischen Punkt $q_c \approx 1.6$ kann man in Abbildung 20 erkennen. Dort sind in einem doppelt logarithmischen Maßstab die Korrelationsfunktionen $\tilde{c}_{\alpha,\beta}$ (7.5) für $q = 1.6$, $q = 1.7$ und $q = 1.8$ aufgetragen (bei $\lambda = 1$,

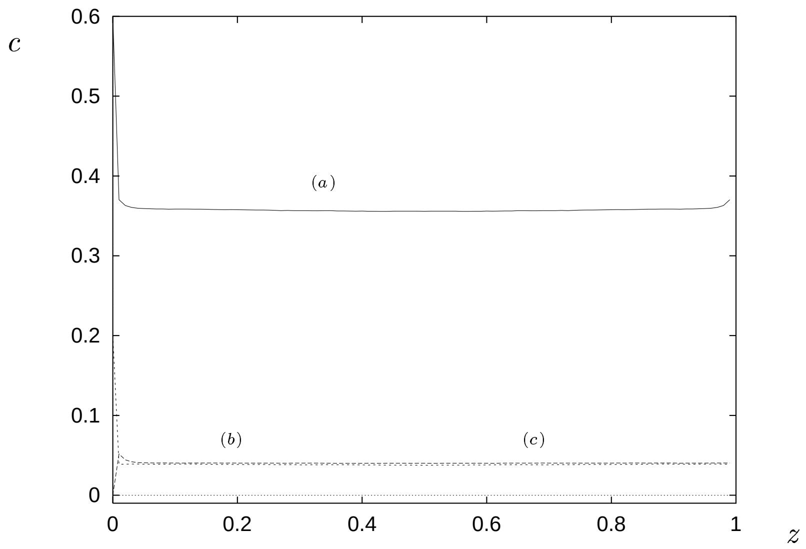

Abbildung 18. Die Korrelationsfunktionen $c_{0,0}$ (a), $c_{1,2}$ (b) und $c_{1,1}$ (c) für $\lambda = 1$, $q = 2.2$, $\rho = 0.2$ und $L = 100$ (Monte-Carlo-Simulationen).

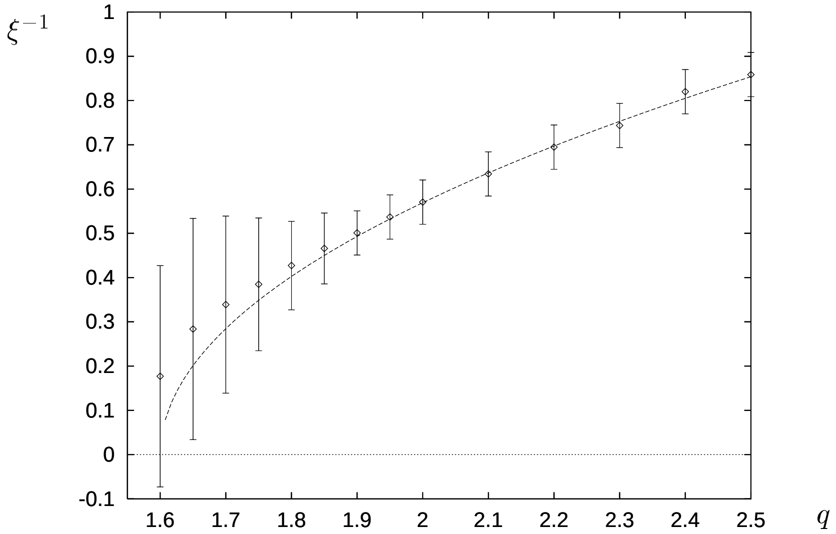

Abbildung 19. Kehrwert der Korrelationslänge ξ aus $c_{1,2}(k) = A\exp(-k/\xi) + p\,m$ als Funktion von q. Berechnet aus Daten des großkanonischen Ensembles ($L \leq 200$), extrapoliert zum Grenzwert für $L \to \infty$ ($\lambda = 1$, $\rho = 0.2$, $q_c = 1.57$).

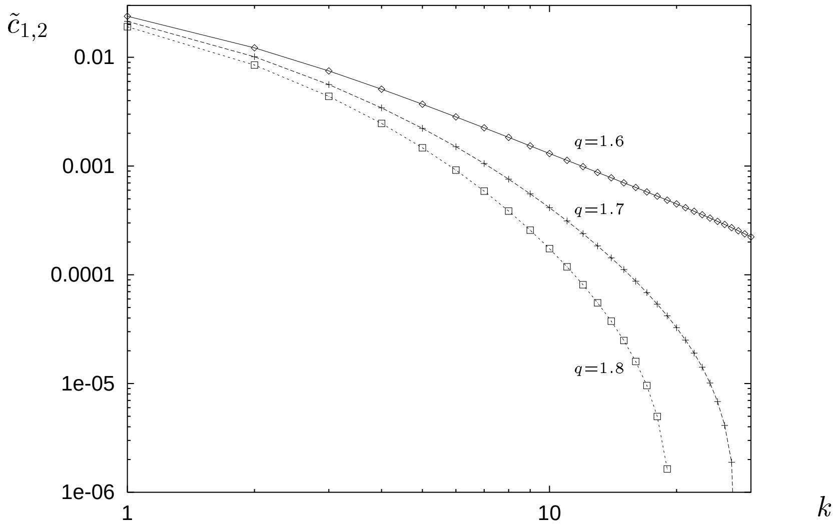

Abbildung 20. Korrelationsfunktionen $\tilde{c}_{1,2}(k)$ (vgl. (7.5) für $\rho = 0.2$, $\lambda = 1$ und $L = 100$ (großkanonisches Ensemble). Beim kritischen Wert q_c ist das Verhalten algebraisch.

$\rho = 0.2$ und $L = 100$). Für $q = 1.6$ findet man einen algebraischen Abfall während für $q > q_c$ das Verhalten exponentiell ist. Der zugehörige Exponent hat den Wert 1.5 ± 0.3, so daß im makroskopischen Limes ($y = k/L$ fest) diese Korrelationen keine Rolle spielen.

Endlichdimensionale Darstellungen der Algebra (4.2) existieren nur in der ungeordneten Phase, wie man erkennt, wenn man den Ausdruck (9.16) für q_c mit der Bedingung (4.9) für die Existenz einer endlichdimensionalen Darstellung vergleicht. Für solche Darstellungen läßt sich z.B. der thermodynamische Limes des Stroms exakt berechnen.

Man benutzt dazu das großkanonische Ensemble (vgl. Abschnitt 4.2) und eine Darstellung der Algebra, in der die Matrix C (4.30) diagonal ist, d.h. man diagonalisiert C und benutzt die entsprechende Basistransformation, um die Darstellung der einzelnen G_α aus (4.4) und (4.5) zu berechnen. Man findet z.B. für $\lambda = 1$, $q = 4$ und $\rho = 0.2$ anhand einer zweidimensionalen Darstellung den Strom $J = 0.2126500216$.
Die mit endlichdimensionalen Darstellungen berechneteten Werte für den thermodynamischen Limes können mit denjenigen verglichen werden, die aus Daten endlicher Gitterlänge extrapoliert werden. Man findet für den Strom Übereinstimmung bis auf acht Dezimalstellen, wenn man von Daten bis zu $L = 200$ extrapoliert, so daß man davon ausgehen kann, daß die mit dem großkanonischen Ensemble für alle Parameterwerte erreichbare Gitterlänge $L = 300$ eine ausreichende Basis für eine verläßliche Extrapolation ist.

11. Eigenschaften des großkanonischen Ensembles

Das durch die Generatoren der quadratischen Algebra definierte großkanonische Ensemble (Abschnitt 4.2) besitzt bemerkenswerte Eigenschaften, denn die großkanonische Zustandssumme verhält sich in vielfacher Weise analog zu der einer Bose-Einstein-Kondensation in der statistischen Mechanik des Gleichgewichts. In diesem Sinne besitzt die Algebra neben ihrer unmittelbaren Bedeutung bei der Bestimmung des stationären Zustands für einen Teilchenzahlsektor weitere physikalische Eigenschaften.
In der folgenden Diskussion seien gleiche Teilchendichten $\rho_1 = \rho_2 = \rho$ und demnach gleiche Fugazitäten $z_1 = z_2 = z$ angenommen. Zunächst kann man die mittlere Dichte des großkanonischen Ensembles in Abhängigkeit von der Fugazität untersuchen. Für $q = 1.2$ und $\lambda = 1$ zeigt Abbildung (21) die entsprechende Kurve für drei verschiedene Gitterlängen. Man erkennt, daß ein Wert der Fugazität existiert, für den im thermodynamischen Limes die Ableitung $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\rho$ unendlich und die Funktion selbst unstetig wird. Oberhalb dieses Wertes konvergiert die Kurve zu $\rho = 0.5$. Der Punkt mit unendlicher Ableitung definiert eine kritische Dichte ρ_c und eine kritische Fugazität z_c. Analog zur Kondensation eines Bose-Gases gilt, daß die kritische Dichte gerade die maximale Dichte ist, die das System enthalten kann, ohne das Kondensation einsetzt, also

$$\rho_{\mathrm{f}} = \rho_c \tag{11.1}$$

mit der von der Gesamtdichte unabhängigen Dichte der fluiden Phase ρ_{f} wie in Abschnitt 9.2. Dies wurde für verschiedene Parameterwerte überprüft und konnte innerhalb der Genauigkeit der Simulationsergebnisse bestätigt werden.
Mit dieser Eigenschaft in Zusammenhang steht die Tatsache, daß in der gemischten Phase die Dichteverteilung des großkanonischen Ensembles bei ihrem Mittelwert für $L \to \infty$ kein Maximum mehr besitzt. Für endliche Gitter ist die Zuordnung von Fugazität und Dichte zwar eindeutig und es existiert ein Maximum, die Verteilung der Dichte wird aber

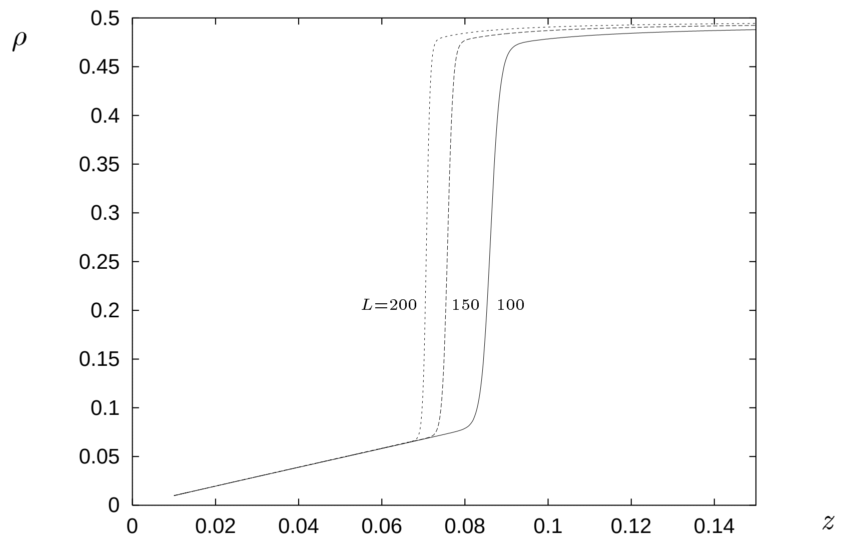

Abbildung 21. Die Dichte ρ als Funktion der Fugazität z für $q = 1.2$, $L = 100$, 150 und 200.

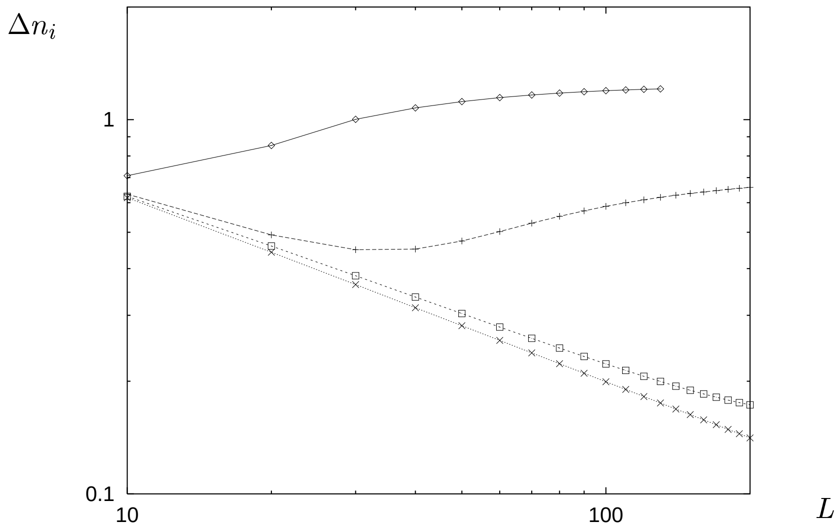

Abbildung 22. Großkanonisches Ensemble: relative Standardabweichung der Teilchenzahl (11.2) für $\rho = 0.2$, $q = 0.9, 1.4, 1.6, 2.2$ und $\lambda = 1$.

mit größerem L immer unschärfer. Dies bedeutet, daß die relative Standardabweichung der Teilchenzahlverteilung

$$\Delta n_i = \frac{<(n_i - <n_i>)^2>^{1/2}}{<n_i>} \tag{11.2}$$

in der gemischten Phase nicht gegen null konvergiert, wie es in der ungeordneten Phase der Fall ist, sondern gegen eine Konstante größer null. Dies wird in Abbildung 22 für $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$ und mehrere Werte von q gezeigt. Analog zur statistischen Mechanik des Gleichgewichts kann man für das großkanonische Ensemble eine "Kompressiblität" κ definieren:

$$\kappa := \frac{(\Delta n_i)^2}{L} \tag{11.3}$$

In der ungeordneten Phase ist das so definierte κ eine Konstante (abhängig von q, λ und ρ), und die Standardabweichung der Teilchenzahlverteilung konvergiert mit $L^{-1/2}$ gegen null. Für die gemischte Phase hingegen divergiert κ mit L.
Für das großkanonische Ensemble kann in Analogie zur statistischen Mechanik des Gleichgewichts ebenfalls ein "Druck" gemäß

$$P := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}L} \log(Z_L^{\mu_1,\mu_2}) \tag{11.4}$$

definiert werden, wobei $Z_L^{\mu_1,\mu_2}$ die großkanonische Zustandssumme (4.29) bezeichnet mit den chemischen Potentialen μ_1 und μ_2 (siehe (4.24)). Abbildung 23 zeigt diese Größe für $q = 1.2$ und $\lambda = 1$ in Abhängigkeit vom Volumen pro Teilchen $1/\rho$. Wiederum erhält man eine überraschende Analogie zur statistischen Gleichgewichtsmechanik: Für $\rho > \rho_c$ ist der Druck maximal und konstant. Das System befindet sich in der gemischten Phase, in der sich ein Kondensat bildet. Auch bei einer Bose-Einstein-Kondensation im Gleichgewicht bleibt der Druck bei einem konstanten Wert, indem ein von ρ abhängiger Teil der Teilchen jeweils ein Kondensat bildet, wie es auch beim hier untersuchten Nichtgleichgewichtsmodell der Fall ist.

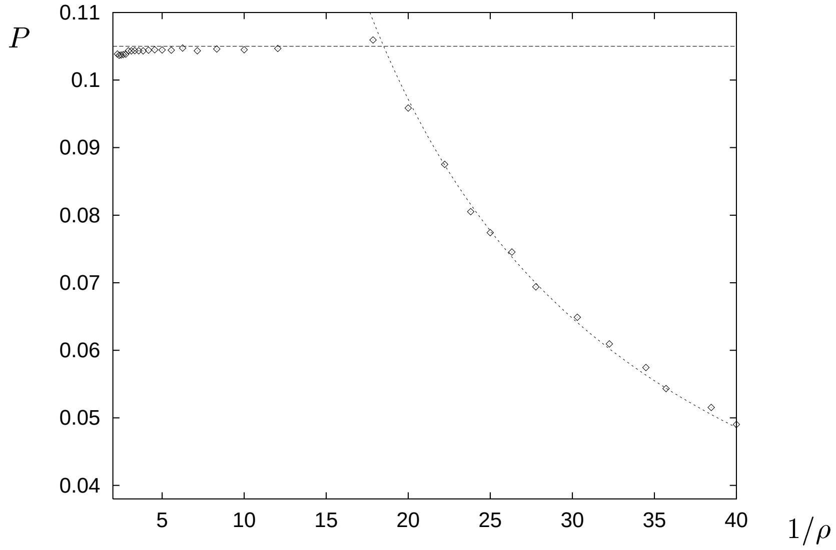

Abbildung 23. "Druck" als Funktion des "relativen Volumens" $1/\rho$. Großkanonisches Ensemble bei $q = 1.2$ und $\lambda = 1$, für $L \to \infty$ extrapoliert.

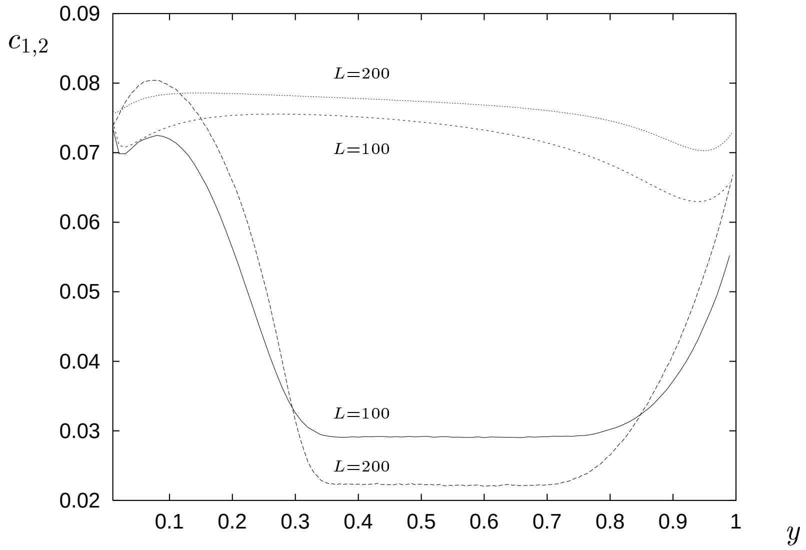

Abbildung 24. Die Korrelationsfunktion $c_{1,2}$ im kanonischen Ensemble (unten, Monte-Carlo-Simulation) und im großkanonischen Ensemble (oben, Matrixproduktmethode) für $\lambda = 1$, $q = 1.2$, $\rho = 0.2$, $L = 100$ und $L = 200$.

Für $\rho < \rho_c$ befindet sich das System in der ungeordneten Phase, in der der Druck in guter Näherung durch $P \propto \rho$ gegeben ist, wie man es (bei einem Gleichgewichtssystem !) von einer Phase ohne makroskopische Struktur erwartet. Die Existenz eines "sinnvollen" Drucks ist keineswegs offensichtlich, sondern eine besondere Eigenschaft der quadratischen Algebra.
Da sich die Teilchenzahlverteilung des großkanonischen Ensembles in der gemischten Phase nicht an ihrem Mittelwert konzentriert, stimmen die im großkanonischen Ensemble berechneten Größen im allgemeinen nicht mit denen des kanonischen Ensembles überein und können dann nicht zur Untersuchung des Kondensationsmodells verwendet werden. Für

die Korrelationsfunktionen bei makroskopischen Abständen ergibt sich eine Abweichung, wie sie z.B. in Abbildung 24 deutlich wird. Der Strom und allgemeine Korrelationsfunktionen bei kurzen Distanzen dürfen hingegen im großkanonischen Ensemble berechnet werden. Ihr thermodynamischer Limes stimmt mit dem bei fester Teilchenzahl bestimmten überein, jedoch nicht die Korrekturen endlicher Gitterlänge, vgl. Kapitel 7.

Die bisher geschilderten Eigenschaften der großkanonischen Zustandssumme legen nahe, daß diese derjenigen eines Gleichgewichtssystems mit Bose-Einstein-Kondensation entspricht. Diese Korrespondenz kann auf den Fall erweitert werden, in dem die innere Symmetrie der Zustandssumme explizit gebrochen wird. In der statistischen Mechanik des Gleichgewichts schreibt man dazu die Zustandssumme eines Bose-Gases mit einem Symmetriebrechungsterm als

$$\begin{aligned} Z(\nu) &= \mathrm{Spur}\left\{\exp\left(-\beta[\sum_k(\epsilon_k-\mu)a_k^\dagger a_k - \nu\sqrt{V}(a_0+a_0^\dagger)]\right)\right\} \\ &= \exp\left(\frac{\beta\nu V}{\epsilon_0-\mu}\right)\mathrm{Spur}\left\{\exp\left(-\beta\sum_k(\epsilon_k-\mu)b_k^\dagger b_k\right)\right\} \\ &= \exp\left(\frac{\beta\nu V}{\epsilon_0-\mu}\right)\ Z(\nu=0)\ , \end{aligned} \tag{11.5}$$

wobei die Transformation durch

$$\begin{aligned} b_0 &= a_0 - \frac{\sqrt{V}\nu}{\epsilon_0-\mu} \\ b_0^\dagger &= a_0^\dagger - \frac{\sqrt{V}\nu}{\epsilon_0-\mu} \\ b_k &= a_k \qquad\qquad \text{für } k \geq 1 \end{aligned}$$

gegeben ist, vgl. [53]. Hierbei parametrisiert ν die $U(1)$-Symmetriebrechung, V bezeichnet das Volumen des Systems, μ das chemische Potential, β den Kehrwert der Temperatur und ϵ_k die Energie des k-ten Zustands, dem der Erzeugungsoperator a_k entspricht. Die Dichte ist durch $\rho = \frac{\partial \log Z}{\partial \beta\mu}$ gegeben.

Führt man eine analoge Symmetriebrechung für das Kondensationsmodell durch, wobei zwei Fugazitäten z_1 und z_2 berücksichtigt werden müssen, so entspricht dies gerade der Transformation

$$G_\alpha \mapsto \exp\left(\frac{-\nu^2}{\log(\frac{z_1 z_2}{{z_c}^2})}\right)\ G_\alpha\ . \tag{11.6}$$

In diesem Zusammenhang ist die Dichte nicht mehr durch den Operator (4.33) festgelegt, sondern durch

$$\rho_\alpha = \frac{z_\alpha}{L}\frac{\partial \log Z_L}{\partial z_\alpha}\ . \tag{11.7}$$

Bei der praktischen Berechnung von Größen in diesem mit ν deformierten Ensemble ergibt sich das Problem, daß die kritische Fugazität z_c nur ungenau bekannt ist. Als Näherung kann man $z_c \approx \rho_c$ mit ρ_c gemäß (9.18) verwenden, was sich als Beobachtung aus den Kurven $\rho(z)$ ergibt. Daneben existieren Effekte endlicher Gitterlänge.

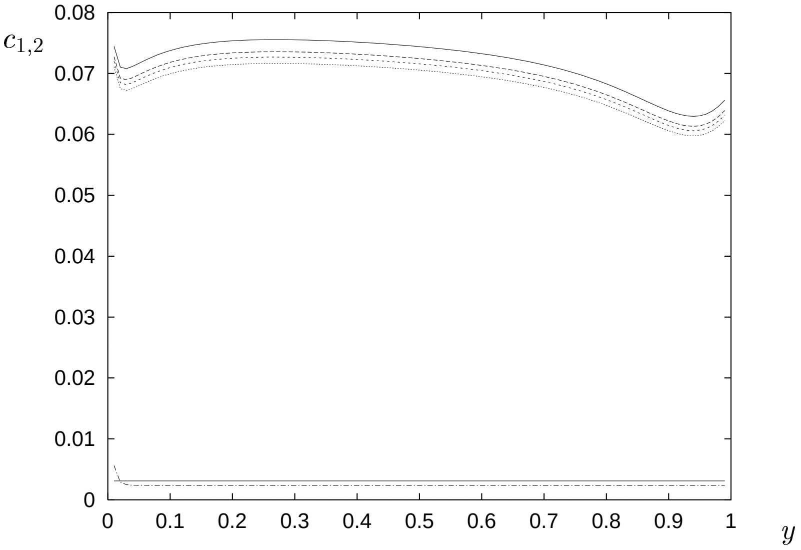

Abbildung 25. Die Korrelationsfunktion $c_{1,2}$ im großkanonischen Ensemble mit Symmetriebrechungsterm (11.6) für $L = 100$, $\rho = 0.2$, $q = 1.2$, $\lambda = 1$ und $\nu = 0, 0.05, 0.06, 0.07, 0.08$ (von oben nach unten). Die flache Gerade gibt die *mean-field*-Vorhersage für die fluide Phase an: $c_{1,2} = 0.031$

In Abbildung 25 wird die Korrelationsfunktion $c_{1,2}$ für $q = 1.2$, $\lambda = 1$, $\rho = 0.2$ und für verschiedene Werte von ν gezeigt. Für genügend großes $\nu > 0$ erhält man die Korrelationsfunktion, die für den fluiden Anteil der gemischten Phase gemäß Gleichung (9.3) erwartet wird. Das Ensemble wurde demnach durch (11.6) dahingehend verändert, daß keine Kondensation mehr stattfindet und die Eigenschaften der fluiden Phase zum Vorschein kommen. Man erwartet, daß dies auch bei beliebig kleinen Symmetriebrechungstermen ν und anschließender Extrapolation $L \to \infty$ der Fall ist.

12. Schlußbemerkungen

In dieser Arbeit konnten kollektive Nichtgleichgewichtseffekte anhand eines einfachen Modells demonstriert werden, dessen stationärer Zustand einer algebraischen Beschreibung zugänglich ist.

Zunächst wurde allgemein die Möglichkeit untersucht, die stationären Wahrscheinlichkeitsverteilungen räumlich diskreter Diffusionsmodelle mit drei Zuständen je Gitterplatz und periodischen Randbedingungen durch quadratische Algebren beschreiben zu können. Diese Matrixproduktmethode wurde dann auf ein spezielles Modell angewendet, das drei Phasen besitzt. In einer der Phasen ist die äußere Translationssymmetrie durch Bildung von Teilchenblöcken im stationären Zustand gebrochen. In einer zweiten tritt ein Kondensationsphänomen auf, bei dem auf dem Gitter eine räumliche Phasentrennung in eine bewegliche Teilchenreihe (das Kondensat) und einen fluiden Anteil stattfindet, dessen Eigenschaften unabhängig von der Gesamtdichte der Teilchen sind. In einer dritten Phase ist der stationäre Zustand ungeordnet ohne makroskopische Strukturen.

Das Auftreten einer gemischten Phase ist zusammen mit der Erklärung dieses Phänomens als "Bose-Einstein-Kondensation" das zentrale physikalische Ergebnis dieser Arbeit: Die gemischte Phase besitzt universelle Eigenschaften, z.B. ist der fluide Anteil des Systems und der resultierende Strom unabhängig von der Gesamtdichte. Die makroskopischen Korrelationsfunktionen im Kondensat können auch für endliche Gitterlängen durch ein Modell erklärt werden. Man erwartet algebraische Korrelationsfunktionen im Kondensat.

Für ein großkanonisches Ensemble, das durch die Algebra der Matrixproduktmethode definiert ist, können Größen in Analogie zur statistischen Mechanik des Gleichgewichts eingeführt werden. Diese verhalten sich wie diejenigen eines Gleichgewichtssystems mit Bose-Einstein-Kondensation.

Im Kontext eines großkanonischen Ensembles, das für ein Nichtgleichgwichtssystem mit Teilchenzahlerhaltung durch die Wahl von Generatoren einer zugehörigen quadratischen Algebra definiert wird, ist die physikalische Bedeutung beispielsweise von Kompressibilität und Druck nicht offensichtlich. Umso interessanter ist die Tatsache, daß diese Größen für das Kondensationsmodell dieser Arbeit ein "sinnvolles" Verhalten zeigen. Darüber hinaus ergibt auch die Veränderung der Zustandssumme analog zu einer expliziten Brechung der inneren Symmetrie der Zustandssumme eines Bose-Gases Ergebnisse, die dem Gleichgewichtsfall entsprechen.

So stellt sich also allgemein die Frage nach einer direkten physikalischen Interpretation des großkanonischen Ensembles, das auf der quadratischen Algebra basiert, jenseits seiner Bedeutung als Rechenhilfe zur Bestimmung stationärer Zustände. Für das Modell dieser Arbeit ist es nicht gelungen, Besetzungszahloperatoren und zugehörige bosonische Zustände zu identifizieren, die die Struktur der kanonischen oder großkanonischen Zustandssumme und ihre Eigenschaften erklären könnten.

Für ein einfacheres Modell, das von Evans untersucht wurde [34], kann die Beziehung zur Bose-Einstein-Kondensation explizit anhand der Zustandssumme gezeigt werden. Es handelt sich dabei um ein periodisches Diffusionsmodell, in dem Teilchen unterschiedliche Geschwindigkeiten besitzen, aber einander nicht überholen können [34]. Dies ergibt einen Phasenübergang zwischen einer ungeordneten Phase, in der die Teilchen gleichmäßig über das Gitter verteilt sind, und einer gemischten Phase, in der sich ein makroskopischer Anteil der leeren Gitterplätze vor dem langsamsten Teilchen befindet. In der gemischten Phase bestimmt das langsamste Teilchen den Strom. Die kanonische Zustandssumme dieses Modells läßt sich berechnen und entspricht exakt derjenigen eines freien Bose-Gases; die Besetzungszahlen bosonischer Zustände entsprechen der Anzahl der Löcher vor den einzelnen Teilchen, der Übergang zwischen ungeordneter und gemischter Phase einer Bose-Einstein-Kondensation. Aber auch für dieses Modell konnte bisher die physikalische Bedeutung des großkanonischen Ensembles nicht geklärt werden.

Für das Modell aus [34] existiert keine Phase mit spontaner Translationssymmetriebrechung. Auch besitzt das Kondensat dieses Modells keine innere Struktur. Es handelt sich physikalisch gesehen nicht um einen kooperativen Effekt, sondern um eine Staubildung, die durch ein einzelnes langsames Teilchen verursacht wird. Dies erkennt man auch daran, daß der Strom in dem Modell aus [34] in der gemischten Phase nicht universell ist.

Im Gegensatz dazu zeigt das Kondensationsmodell dieser Arbeit trotz seiner Einfachheit verschiedene kollektive Phänomene. Die Existenz eines Kondensats mit innerer Struktur und universellen Eigenschaften ist eine für eindimensionale und lokale Diffusionsmodelle neue und überraschende Eigenschaft.

Literatur

[1] siehe z.B. R. K. Pathria 1973, *Statistical Mechanics*, Pergamon Press

[2] B. M. McCoy und T. T. Wu 1973, *The two-dimensional Ising model*, Harvard University press, sowie darin enthaltene Literaturverweise

[3] N. G. van Kampen 1981, *Stochastic processes in physics and chemistry*, North-Holland

[4] C. W. Gardiner 1990, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, Springer

[5] B. Schmittmann und R. K. P. Zia 1996, *Statistical mechanics of driven diffusive systems*, in: C. Domb und J. L. Lebowitz (Hrsg.), *Phase transitions and critical phenomena*, Bd. 17, Academic Press

[6] V. Privman (Hrsg.) 1997, *Nonequilibrium statistical dynamics in one dimension*, Cambridge University Press

[7] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim und V. Pasquier 1993, *Exact solution of a 1d asymmetric exclusion model using a matrix formulation*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 1493

[8] F. C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel und V. Rittenberg 1994, *Reaction-diffusion processes, critical dynamics and quantum chains*, *Ann. Phys.* **230**, 250

[9] F. H. L. Eßler und V. Rittenberg 1996, *Representations of the quadratic algebra and partially asymmetric diffusion with open boundaries*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **19**, 3375

[10] J. Krug 1991, *Boundary induced phase transitions in driven diffusive systems*, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1882

[11] B. Derrida, E. Domany und D. Mukamel 1992, *An exact solution of a one-dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries*, *J. Stat. Phys.* **69**, 667

[12] C. Boldrighini, G. Cosimi, S. Frigio und M. Grasso Nuñes 1989, *Computer simulations of shock waves in the completely asymmetric simple exclusion process*, *J. Stat. Phys.* **55**, 611

[13] S. A. Janowsky und J. L. Lebowitz 1992, *Finite-size effects and shock fluctuations in the asymmetric simple exclusion process*, *Phys. Rev.* **A45**, 618

[14] F. J. Alexander, S. A. Janowsky, J. L. Lebowitz und H. van Beijeren 1993, *Shock fluctuations in one-dimensional lattice fluids*, *Phys. Rev.* **E47**, 403

[15] G. Schütz 1993, *Time-dependent correlation functions in a one-dimensional asymmetric exclusion process*, *Phys. Rev.* **E47**, 4265

[16] B. Derrida, S. A. Janowsky, J. L. Lebowitz und E. R. Speer 1993, *Microscopic shock profiles: exact solution of a non-equilibrium system*, *Europhys. Lett.* **22**, 651

[17] B. Derrida, S. A. Janowsky, J. L. Lebowitz und E. R. Speer 1993, *Exact solution of the totally asymmetric simple exclusion process: shock profiles*, *J. Stat. Phys.* **71**, 813

[18] K. Mallick 1996, *Shocks in the asymmetric exclusion model with an impurity*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 5375

[19] H.-W. Lee, V. Popkov und D. Kim 1997, *Two-way traffic flow: exactly solvable model of traffic jam*, `http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9708006`

[20] K. Krebs 1998, in Vorbereitung

[21] P. F. Arndt, T. Heinzel und V. Rittenberg 1997, *First order phase transitions in one-dimensional steady states*, erscheint in *J. Stat. Phys.* **90**

[22] M. R. Evans, D. P. Foster, C. Godrèche und D. Mukamel 1995, *Spontaneous symmetry breaking in one dimensional driven diffusive processes*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 208, und *Asymmetric exclusion model with two species: spontaneous symmetry breaking*, *J. Stat. Phys.* **80**, 69

[23] G. Schütz und E. Domany 1993, *Phase transitions in an exactly soluble one-dimensional exclusion process*, *J. Stat. Phys.* **72**, 277

[24] C. Godrèche, J. M. Luck, M. R. Evans, D. Mukamel, S. Sandow und S. R. Speer 1995, *Spontaneous symmetry breaking: exact results for a biased random walk model of an exclusion process*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, 6039

[25] P. F. Arndt und T. Heinzel 1997, *Metastability and spinodal points for a random walker on a triangle*, `http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9710287`, eingereicht bei *J. Stat. Phys.*

[26] M. R. Evans, Y. Kafri, H. M. Koduvely und D. Mukamel 1998, *Phase separation in one-dimensional driven diffusive systems*, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 425

[27] P. F. Arndt, T. Heinzel und V. Rittenberg 1997, *Stochastic models on a ring and quadratic algebras. The three species diffusion problem*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 833

[28] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb und H. Tasaki 1988, *Valence-bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets*, *Comm. Math. Phys.* **115**, 477

[29] M. Fannes, B. Nachtergaele und R. F. Werner 1989, *Exact antiferromagnetic ground states of quantum spin chains*, *Europhys. Lett.* **10**, 633

[30] H. Niggemann, A. Klümper und J. Zittarz 1997, `http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9702178`, sowie darin enthaltene Literaturverweise

[31] V. Hakim und J. P. Nadal 1983, *Exact results for 2D directed animals on a strip of finite width*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **16**, L213

[32] B. Derrida, M. R. Evans und D. Mukamel 1993, *Exact diffusion constant for one-dimensional exclusion models*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 4911

[33] B. Derrida und K. Mallick 1997, *Exact diffusion constant for the one-dimensional partially asymmetric exclusion model*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 1031

[34] M. R. Evans 1996, Bose-Einstein condensation in disordered exclusion models and relation to traffic flow, *Europhys. Lett.* **36**, 13

[35] G. I. Menon, M. Barma und D. Dhar 1997, *Conservation laws and integrability of a one-dimensional model of diffusing dimers*, *J. Stat. Phys.* **86**, 1237

[36] P. F. Arndt, T. Heinzel und V. Rittenberg 1998, *Spontaneous breaking of translational invariance in one-dimensional stationary states on a ring*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, L45

[37] P. F. Arndt, T. Heinzel und V. Rittenberg 1998, *Spontaneous breaking of translational invariance and Bose-Einstein condensation in one-dimensional stationary states on a ring*, wird eingereicht bei *J. Stat. Phys.*

[38] C. H. Bennett und G. Grinstein 1985, *Role of irreversibility in stabilizing complex and nonergodic behavior in locally interacting discrete systems*, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 657

[39] S. Sandow 1994, *Partially asymmetric exclusion process with open boundaries*, *Phys. Rev.* **E50**, 2660

[40] F. C. Alcaraz, S. Dasmahapatra und V. Rittenberg 1997, *N-species stochastic models with boundaries and quadratic algebras*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 845

[41] B. Derrida, M. R. Evans und K. Mallick 1995, *Exact diffusion constant of a one-dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries*, *J. Stat. Phys.* **79**, 833

[42] N. Rajewski, A. Schadschneider und M. Schreckenberg 1996, *The asymmetric exclusion model with sequential update*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, L305

[43] A. Honecker und I. Peschel 1996, *Matrix-product states for a one-dimensional lattice gas with parallel dynamics*, `http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9606053`

[44] H. Hinrichsen 1996, *Matrix product ground states for asymmetric exclusion processes with parallel dynamics*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 3659

[45] H. Hinrichsen, S. Sandow und I. Peschel 1996, *On matrix product ground states for reaction-diffusion models*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 2643

[46] K. Krebs und S. Sandow 1997, *Matrix product eigenstates for one-dimensional stochastic models and quantum spin chains*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 3165

[47] K. Krebs 1997, private Mitteilung

[48] M. R. Evans 1997, private Mitteilung

[49] R. Bulirsch und J. Stoer 1964, *Fehlerabschätzung und Extrapolation mit rationalen Funktionen bei Verfahren vom Richardson-Typus*, *Numer. Math.* **6**, 413; M. Henkel und G. Schütz 1988, *Finite lattice extrapolation algorithms*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **21**, 2617

[50] W. Krauth 1996, *Introduction to Monte Carlo algorithms*, `http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9612186`

[51] J. Schnakenberg 1995, *Algorithmen in der Quantentheorie und Statistischen Physik*, Zimmermann-Neufang, sowie darin enthaltene Literaturverweise

[52] C. Godrèche 1997, private Mitteilung

[53] J. D. Gunton und M. J. Buckingham 1968, *Condensation of the ideal Bose gas as a cooperative transition*, *Phys. Rev.* **166**, 152

Dank

Zuerst möchte ich mich bei Professor Vladimir Rittenberg für die hervorragende Betreuung und Unterstützung bedanken.

Peter Arndt danke ich für die sehr gute Zusammenarbeit und die Möglichkeit, immer alles besprechen zu können.

Bei Ulrich Bilstein möchte ich mich für seine Kommentare zur allgemeinen und politischen Lage und die Numerik-Hilfe bedanken, bei Gabi Heukemes für das Korrekturlesen und alle sonstige Unterstützung, bei Klaus Krebs für seine physikalischen Hinweise und philosophischen Anmerkungen und für seine Bereitschaft, diese Arbeit durchzusehen, bei Horatiu Simon für die aufmunternden Gespräche, und bei Michael Rösgen und Andreas Wisskirchen für die Computer-Hilfe. Darüber hinaus danke ich den anderen Mitgliedern der Theoriegruppe für Unterstützung bei den verschiedensten Problemen.

Hilfreich waren auch physikalische Diskussionen mit Fabian Eßler, Claude Godrèche, Haye Hinrichsen und Andreas Honecker.

Diese Arbeit entstand mit finanzieller Unterstützung der Graduiertenförderung des Landes Nordrhein-Westfalen und des DAAD.