Untersuchung des kritischen Verhaltens der Quantenchromodynamik mit zwei und drei entarteten Flavour-Freiheitsgraden

Diplomarbeit

an der

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von

Christian Schmidt

November 2000

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

Die Quantenchromodynamik (QCD) beschreibt auf mikroskopischem Niveau die Wechselwirkung zwischen Quarks und Gluonen. Diese Kraft ist für die Bindung der Nukleonen in stabilen Atomkernen verantwortlich und wird daher auch Kernkraft genannt. Es sind sechs verschiedene Quarks bekannt, sie werden *Up, Down, Charm, Strange, Top* und *Bottom* genannt (*Flavour-Freiheitsgrade*). Neben ihrer elektrischen Ladung tragen die Quarks auch eine Farbladung, von der es drei verschiedene gibt, nämlich rot, grün und blau (*Colour-Freiheitsgrade*). Die Feldquanten, die zwischen den Farbladungen vermitteln, sind die Gluonen, von denen es acht verschiedene gibt und die ihrerseits eine Farbladung tragen. Die grundlegenden Gleichungen der QCD stammen aus den Prinzipien der lokalen Quantenfeldtheorie (QFT) und der Eichtheorie und sind konzeptionell einfach. Auf den ersten Blick scheinen sie wenig mit der Realität zu tun zu haben, denn Quarks und Gluonen sind nicht direkt zu beobachten. Sie definieren jedoch eindeutige Algorithmen, die mit der Hilfe eines Computers im Prinzip jede Frage der QCD beantworten können. So kann z.B. das beobachtbare Hadronen-Spektrum[1] präzise berechnet werden. Weiterhin besitzt die QCD eine Reihe von Symmetrien, die bislang in der Natur nicht beobachtet wurden. Ein Grund dafür ist die spontane Symmetrie-Brechung, die zu verschiedenen Phasenübergängen in der QCD führt. Geht man zu sehr hohen Temperaturen/Drücken, so gelangt man von der gewöhnlichen Materie, die aus gebundenen farbneutralen Quarkzuständen besteht, zum Quark-Gluon-Plasma (QGP), einem Gas aus "freien" Quarks und Gluonen. Die Untersuchung der QCD-Phasenübergänge ist aus mehreren Gründen interessant. Zum Einen spielen sie in der Kosmologie eine Rolle: Zu der Zeit $t \approx 10^{-6}s$ nach dem Urknall vollzog sich vermutlich im frühen Universum bei einer Temperatur von $T \approx 170MeV$ der Übergang vom QGP zu gewöhnlicher hadronischer Materie. Dieser Übergang ist eventuell für die inhomogene Materieverteilung verantwortlich, die im heutigen Universum beobachtet wird. Zum Anderen könnte sich im Inneren von Neutronensternen bei sehr hohem Druck aber relativ geringer Temperatur ein Kern aus QGP befinden. Daher ist die Kenntnis über die QCD-Phasenübergänge auch in der Astrophysik für die Theorie der Sternentwicklung oder Sternenkollisionen von Interesse. Außerdem glaubt man, kürzlich erstmals QGP durch Schwerionen-Stöße im Labor erzeugt zu haben [1].

Im Rahmen dieser Arbeit sind Computer-Simulationen der QCD durchgeführt worden. Anhand der Ergebnisse wird das QCD-Vakuum bei verschiedenen Temperaturen und

[1] Als Hadronen bezeichnet man Baryonen und Mesonen, die man mit farbneutralen Drei-Quark- bzw. Quark-Antiquark-Zuständen identifiziert.

nackten Quarkmassen untersucht. Dabei werden nur die idealisierten Fälle von zwei bzw. drei Flavour-Freiheitsgraden gleicher Masse betrachtet. Ein chemisches Potential, welches zu einer endlichen Baryondichte führt, wurde nicht berücksichtigt. Unter bestimmten Umständen, d.h. an kritischen Punkten bestimmt durch kritische nackte Quarkmassen, kommt es zu Phasenübergängen zweiter Ordnung. Diese Phasenübergänge sind von besonderem Interesse, denn sie weisen das Phänomen der Universalität auf. Das Ziel dieser Arbeit ist die Bestimmung von zwei kritischen Punkten der QCD sowie der zugehörigen Universalitätsklassen.

Diese Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut: Im ersten Kapitel werden wichtige Grundlagen dargestellt, die für das Verständnis eines Phasenüberganges hilfreich sind, unter anderem werden die Begriffe "Renormierung" und "Universalität" diskutiert. Im zweiten Kapitel werden die Symmetrien und Phänomene der QCD beschrieben und ein Phasendiagramm der QCD erstellt. Zur Berechnung physikalischer Observablen muß auch die QCD, wie fast jede QFT, regularisiert werden. Der Computer-Simulation besonders dienlich ist hier die Gitterregularisierung, die in Kapitel drei vorgestellt wird. Die verwendeten Simulationsverfahren werden dann in Kapitel vier beschrieben und die erzielten Resultate im fünften Kapitel dargelegt. Schließlich wird im sechsten Kapitel noch eine kurze Zusammenfassung gegeben.

Kapitel 1

Theorie der kritischen Phänomene

Unter dem kritischen Verhalten eines Systems versteht man im Allgemeinen das Verhalten dieses Systems in der Nähe eines Phasenübergangspunktes zweiter Ordnung. Häufig treten solche Punkte als Endpunkt einer Phasenübergangslinie erster Ordnung auf. In diesem Kapitel wird daher zunächst einmal die Ordnung eines Phasenüberganges definiert. Weiter wird das kritische Verhalten eines Systems anhand von Skalengesetzen beschrieben, sowie auf die Einflüsse eines endlichen Volumens eingegangen. Anhand dieser Erkenntnisse werden später zwei kritische Punkte in der QCD lokalisiert und der Versuch einer Bestimmung der zugehörigen Universalitätsklassen unternommen.

1.1 Phasenübergänge erster und zweiter Ordnung

Ist ein thermodynamisches System im Gleichgewicht, so sind alle Zustandsgrößen durch die Angabe endlich vieler Zustandsvariablen $y_1, \ldots, y_\alpha$ bestimmt. In einem einkomponentigen homogenen fluiden System reicht bereits die Angabe von Temperatur T und Druck P ($y = (T, P)$) um alle anderen Größen mit Hilfe der Zustandsgleichung zu berechnen.

Bei einem Phasenübergang ändern sich die thermodynamischen Zustandsgrößen eines Systems in markanter Weise. Ermöglicht wird ein Phasenübergang durch den Austausch von Teilchen aus einer Phase in eine andere. Die treibende Kraft ist das chemische Potential $\mu(y)$, welches als Ableitung der Energie nach der Teilchenzahl (bei konstanter Entropie und konstantem Volumen) definiert ist. Bei gegebenen Zustandsvariablen y wird im thermischen Gleichgewicht das chemische Potential, den Extremal-Bedingungen entsprechend, minimiert. Das System wird sich also wie in Abbildung 1.1(a) immer in der Phase mit geringerem chemischen Potential befinden. Der Übergang zwischen zwei Phasen kann diskret oder kontinuierlich erfolgen. Abbildung 1.1(b) zeigt das Phasen-Diagramm eines einfachen Stoffes, der aus einer festen, flüssigen und gasförmigen Phase bestehen soll. Auf einer Linie im Phasen-Diagramm, z.B. auf der Dampfdruck-Kurve zwischen der gasförmigen und der

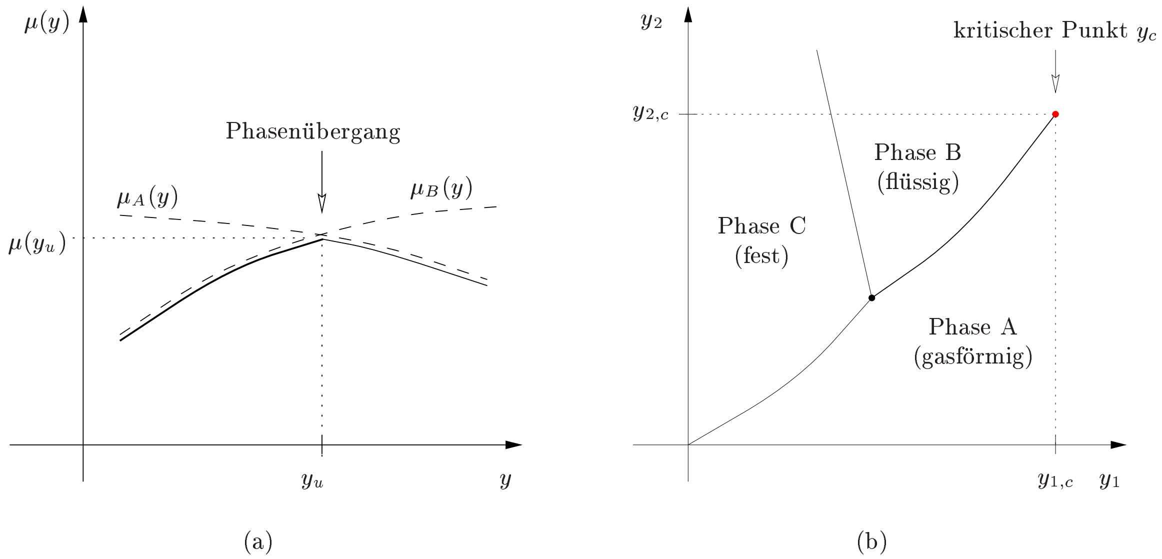


Abbildung 1.1: (a) *Verhalten des chemischen Potentials des Systems am Phasenübergang (durchgezogene Linie), μ_A bezeichnet das chemische Potential der Phase A und μ_B das der Phase B.* (b) *Phasendiagramm eines einfachen Stoffes.*

flüssigen Phase, können zwei Phasen eines Stoffes miteinander koexistieren. Am Tripel-Punkt können sogar alle drei Phasen miteinander koexistieren. Ist der Phasenübergang diskret, so durchläuft das System einen Weg, der eine Linie im Phasen-Diagramm schneidet. Wie man sieht, endet die Dampfdruck-Kurve in einem kritischen Punkt. Durchläuft das System zwischen zwei Punkten mit definierter Phase einen Weg durch den kritischen Punkt, so ist der Phasenübergang kontinuierlich. Im Bereich $y_1 > y_{1,c}$ findet in y_2-Richtung kein Phasenübergang mehr statt.

Die Phasenübergänge kann man nach Ehrenfest durch das chemische Potential klassifizieren. Man spricht von einem Phasenübergang n-ter Ordnung, wenn mindestens eine der n-ten Ableitungen des chemischen Potentials nach den Zustandsvariablen eine Unstetigkeit aufweist, während alle (n-1)-ten Ableitungen stetig sind. Wie die Abbildung 1.1(a) schon vermuten läßt, ist im Allgemeinen nicht zu erwarten, daß die Ableitung des chemischen Potentials stetig ist.

Die theoretische Behandlung des Übergangs beginnt mit der Wahl einer makroskopischen Größe, die sich in charakteristischer Weise am Übergangspunkt ändert. Dieser Parameter wird Ordnungsparameter genannt. Heute teilt man Phasenübergänge üblicherweise nach dem Verhalten dieses Ordnungsparameters ϕ beim Übergang ein:

$$\phi = \begin{cases} \text{unstetig} & \text{Übergang 1. Ordnung} \\ \text{stetig} & \text{Übergang 2. Ordnung.} \end{cases}$$

Die Wahl des Ordnungsparameters ist in vielen Fällen naheliegend, wie z.B. die Magnetisierung beim ferromagnetischen Übergang, aber nicht eindeutig. Auf die Schwierigkeit, vernünftige Ordnungsparameter in der vollen QCD (QCD mit dynamischen Fermionen) zu finden, wird weiter unten noch eingegangen. Der Ordnungsparameter wird so definiert, daß sein Erwartungswert am kritischen Punkt verschwindet, also $\langle\phi(y_c)\rangle = 0$. Weitere Beispiele für Ordnungsparameter sind der Polyakov Loop beim Deconfinement-Übergang oder das chirale Kondensat beim chiralen Phasenübergang (sie sind Gegenstand der Kapitel 2.2 und 2.3).

An einem Phasenübergang erster Ordnung beobachtet man das Auftreten einer latenten Umwandlungswärme q, die zur Überwindung der Kohäsionskräfte benötigt wird. Bedingt ist sie durch die Diskontinuitäten der partiellen Ableitungen des chemischen Potentials, insbesondere der Entropiedichte. Die latente Wärme ist definiert als

$$q = T_u(s_A - s_B). \tag{1.1}$$

Hierbei bezeichnet T_u die Übergangstemperatur und $(s_A - s_B)$ die Diskontinuität in der Entropiedichte. Die latente Wärme geht in die Clausius-Clapeyron-Gleichung ein, die eine Beschreibung des Phasenüberganges erster Ordnung liefert. Sie stellt einen Zusammenhang zwischen der Steigung der Übergangskurve im Raum der Zustandsvariablen und der Diskontinuität im Ordnungsparameter her.

$$\frac{dy_2(y_1)}{dy_1} = \frac{q}{T_u\ \Delta\phi} \qquad \text{(Clausius-Clapeyron-Gleichung)} \tag{1.2}$$

Der kritische Punkt y_c ist durch das Verschwinden der latenten Wärme ausgezeichnet.

Eine weitere wichtige Größe, die den kritischen Punkt auszeichnet, ist die Korrelationslänge ξ. Sie bezeichnet die Distanz, über die mikroskopische Freiheitsgrade signifikant miteinander korreliert sind, und wird aus der Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \langle\ \phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}')\ \rangle - \langle\ \phi(\mathbf{r})\ \rangle\langle\ \phi(\mathbf{r}')\ \rangle \\ &= \Big\langle\ \Big(\phi(\mathbf{r}) - \langle\ \phi(\mathbf{r})\ \rangle\Big)\Big(\phi(\mathbf{r}') - \langle\ \phi(\mathbf{r}')\ \rangle\Big)\ \Big\rangle \end{aligned} \tag{1.3}$$

ermittelt. Diese zeigt im kritischen Bereich näherungsweise das Verhalten

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}') = c_0 \frac{\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{\xi(T)}\right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{1.4}$$

(*Ornstein-Zernike-Verhalten*). Der Umstand, daß bei einem Phasenübergang erster Ordnung zwei Phasen miteinander koexistieren können, impliziert eine endliche Korrelationslänge. Am kritischen Punkt hingegen befindet sich das System in einer einheitlichen kritischen Phase mit Fluktuationen über alle Längenskalen, was zu einer divergenten Korrelationslänge führt. Da im Bereich der kritischen Fluktuationen die Korrelationslänge wesentlich größer als die übliche Reichweite der Teilchen-Wechselwirkung wird, kommt es zu einem universellen Verhalten von Systemen in der Nähe eines kritischen Punktes. Die Details der Wechselwirkung spielen dort keine Rolle mehr, und die Korrelationslänge wird zur einzigen relevanten Längenskala.

1.2 Landau-Theorie

Landau bemerkte 1937 eine wichtige gemeinsame Eigenschaft aller Phasenübergänge, nämlich das Auftreten einer zusätzlichen Symmetrie am Übergangspunkt, bzw. die spontane Brechung dieser Symmetrie. Er lieferte eine erste klassische Beschreibung von Phasenübergängen zweiter Ordnung, in dem er die freie Energie $\mathcal{F}$ in einer Potenzreihe des Ordnungsparameters entwickelte. Für ein isotropisches System mit der Temperatur T und einem äußerem Feld [1] h machte er den Ansatz

$$\mathcal{F}(T,h,\phi) = \mathcal{F}_0(T,h,\phi) + V\Big\{-h\phi + \frac{1}{2}a(T,h)\phi^2 + \frac{1}{4}b(T,h)\phi^4 + \cdots\Big\}, \tag{1.5}$$

wobei V das Volumen des Systems ist. Der Gleichgewichtswert des Ordnungsparameters ϕ ist nun über die Minimierungs Bedingung der freien Energie $\mathcal{F}$ gegeben

$$\frac{\partial\mathcal{F}(T,h,\phi)}{\partial\phi} = 0, \qquad \frac{\partial^2\mathcal{F}(T,h,\phi)}{\partial\phi^2} > 0. \tag{1.6}$$

Im Fall $h = 0$ und $a, b > 0$ gibt es nur eine triviale Lösung, nämlich $\phi_0 = 0$. Das System befindet sich dann in der nicht-geordneten Phase. Nimmt man jedoch an, daß $a(T)$ eine analytische Funktion der Temperatur T ist, die für $T < T_c$ negativ ist, dann gibt es für $h = 0$, wie in Abbildung 1.2(a) zu sehen, zwei Lösungen aus

$$\phi_0^2 = -\frac{a(T)}{b(T)}. \tag{1.7}$$

Wenn man die Entwicklung von $a(T)$ nach der reduzierten Temperatur $t \equiv (T - T_c)/T_c$ schon nach dem linearen Term abbricht

$$a(T) = \alpha t + \cdots \tag{1.8}$$

und $b(T)$ durch eine Konstante approximiert, erhält man schließlich

$$\phi = \begin{cases} (-\alpha t/b)^{1/2}, & t < 0 \\ 0, & t > 0. \end{cases} \tag{1.9}$$

Das System besitzt also einen zweifach entarteten Grundzustand. Man sagt auch, es liegt eine $Z(2)$-*Symmetrie* vor. Das ist natürlich darauf zurückzuführen, daß im Ansatz (1.5) ungerade Potenzen von ϕ unterdrückt wurden. Wie in Abbildung 1.2(b) zu sehen ist es möglich, auch für Phasenübergänge erster Ordnung einen Landau-Ansatz der freie Energie zu finden. Wie in Kapitel 1.3 beschrieben wird, zeigen meßbare Größen in der kritischen Region häufig ein potenzartiges Verhalten. Der Exponent in der t-Abhängigkeit von ϕ heißt β. Aus (1.9) geht hervor, daß die Landau-Theorie für alle Systeme mit einer $Z(2)$-*Symmetrie* den Exponenten $\beta = 1/2$ vorhersagt. Betrachtet man örtliche Fluktuationen des Ordnungsparameters ($\phi = \langle\{\phi\}\rangle$), so verallgemeinert sich die Landau-freie-Energie zum Ginzburg Landau-Funktional $\mathcal{F}(T, \{\phi\}, \{h\})$ (eingeführt von Ginzburg und Landau

[1] Abhängig vom betrachteten System kann h z.B. ein Magnetfeld in Spin-Modellen oder der Druck in Flüssigkeit-Gas-Modellen sein.

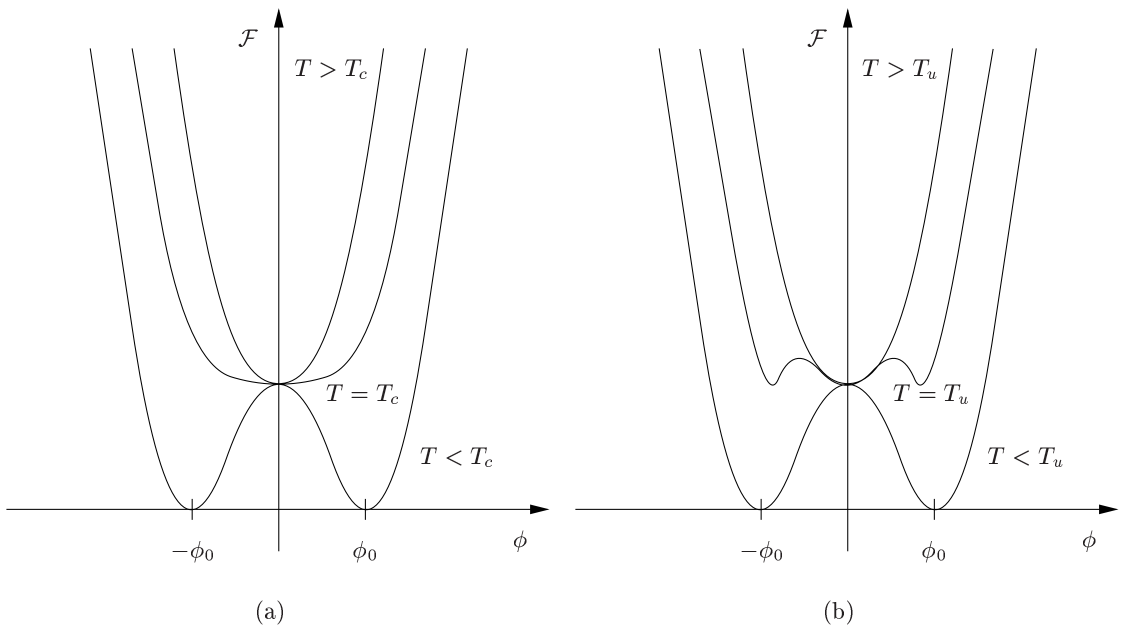


Abbildung 1.2: *Die freie Energie als Funktion des Ordnungsparameters,* (a) *beim Phasenübergang zweiter Ordnung*, (b) *beim Phasenübergang erster Ordnung.*

1950). Nun wird in der Entwicklung der freien Energie zusätzlich zu den Termen in (1.5) noch den Term $\frac{1}{2}c(\nabla\phi(r))^2$ berücksichtigt. Die Wahrscheinlichkeit, die Konfiguration $\{\phi\}$ eines System anzutreffen, ist in der statistischen Mechanik definiert als

$$\rho\{\phi\} = Z^{-1}\exp(-\frac{1}{k_B T}\mathcal{F}\{\phi\}). \tag{1.10}$$

Die Boltzmann-Konstante k_B wird im Weiteren eins gesetzt. Die wahrscheinlichste Konfiguration $\{\phi\}_{mf}$, die zu den meßbaren Größen den größten Beitrag liefert, erfüllt die zu (1.6) analoge Bedingung der Funktionalableitung

$$\frac{\delta\mathcal{F}(T,\{\phi\},\{h\})}{\delta\{\phi\}} = 0. \tag{1.11}$$

Diese Approximation wird *Landau-Näherung*, *mean-field-Näherung*, oder nach Weiss *Molekular-Feld-Näherung* genannt.

Zwei Dinge seien noch bemerkt: Zum einen weiß man aus der Thermodynamik, daß Thermodynamische Potentiale konvexe Funktionen sind, aber wie in der Abbildung 1.2 deutlich zu sehen, ist $\mathcal{F}$ hier nicht konvex. Der zur Landau-freien-Energie zugehörige Hamilton Operator $\mathcal{H}_{mf}$ muß als makroskopisch aufgefaßt werden, er entsteht nach unendlich vielen Vergröberungsschritten aus dem physikalischen Hamilton Operator der mikroskopischen Freiheitsgrade (siehe Kapitel 1.5). Zum anderen ist die Landau-Näherung nur gültig wenn die Fluktuationen des Ordnungsparameters klein sind, d.h. $\langle\delta\phi(\mathbf{r})^2\rangle \ll \phi_0$. In der Nähe des kritischen Punktes, wo die Fluktuationen groß werden, bricht diese Näherung zusammen.

1.3 Kritische Exponenten

In der Nähe eines Phasenüberganges zweiter Ordnung beobachtet man häufig, daß eine physikalischen Eigenschaft F von der reduzierten Temperatur

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \tag{1.12}$$

folgendermaßen abhängt:

$$F(t) = c + at^{\varphi}(1 + a_1 t^{\omega} + a_2 t^{2\omega} + \cdots), \tag{1.13}$$

mit $\omega > 0$. Für $t \to 0$ verschwinden alle Terme in der Klammer (bis auf die 1), so daß $F(t)$ in der unmittelbaren Nähe von T_c das Potenzgesetz $F(t) \propto t^{\varphi}$ erfüllt. Der Exponent φ bestimmt somit das Temperaturverhalten von F im kritischen Bereich und wird als *kritischer Exponent* bezeichnet. Man definiert eine ganze Reihe dieser Exponenten für verschiedene Observablen:

$$\begin{array}{lrcl} \text{Spezifische Wärme} & c & \propto & |t|^{-\alpha} \\ \text{Ordnungsparameter für } t < 0 & \langle\phi_0\rangle & \propto & |t|^{\beta} \\ \text{Suszeptibilität} & \chi & \propto & |t|^{-\gamma} \\ \phi - h - \text{Relation bei } t = 0 & \langle\phi_0\rangle & \propto & |h|^{1/\delta} \\ \text{Korrelationslänge} & \xi & \propto & |t|^{-\nu}, \end{array} \tag{1.14}$$

wobei die Suszeptibilität[2] als Ableitung des Ordnungsparameters nach dem äußeren Feld definiert ist

$$\chi = \partial\langle\phi_0\rangle / \partial h. \tag{1.15}$$

Für Größen, die auf beiden Seiten des Phasenüberganges definiert sind, wie z.B. die spezifische Wärme, die Suszeptibilität oder die Korrelationslänge, macht man manchmal die Unterscheidung

$$c \propto \begin{cases} |t|^{-\alpha} \\ |t|^{-\alpha'} \end{cases} \qquad \chi \propto \begin{cases} |t|^{-\gamma} \\ |t|^{-\gamma'} \end{cases} \qquad \xi \propto \begin{cases} |t|^{-\nu} & (t > 0) \\ |t|^{-\nu'} & (t < 0). \end{cases} \tag{1.16}$$

Man beobachtet jedoch, daß im Allgemeinen die kritischen Exponenten auf beiden Seiten des Überganges gleich groß sind.
Über die Korrelationsfunktion läßt sich noch ein weiterer kritischer Exponent η einführen. Er wird als *anomale Dimension* bezeichnet und beschreibt die Abweichung der Korrelationsfunktion von dem Ornstein-Zernike-Verhalten (1.4)

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{d-2+\eta}}. \tag{1.17}$$

In den kritischen Exponenten manifestiert sich die Universalität physikalischer Eigenschaften in der Nähe des kritischen Punktes. Die *Universalitätshypothese* [2] besagt, daß die kritischen Exponenten für fast alle thermodynamischen Systeme gleich sind. Sie hängen nur ab von

[2] Der magnetischen Suszeptibilität in Ferromagneten entspricht die Kompressibilität im Flüssigkeit-Gas-System.

- der Dimension d des Systems
- der Reichweite der Teilchen-Wechselwirkung
- der Dimension n des Ordnungsparameter. [3]

Bei der Teilchen-Wechselwirkung spielt nur eine Rolle, ob sie langreichweitig, d.h. mit dem Abstand abfallend wie $\mathbf{r}^{-d+2}$ oder langsamer, oder kurzreichweitig ist. Details der mikroskopischen Wechselwirkung sind unwichtig. Alle Modelle mit den gleichen kritischen Exponenten werden in einer *Universalitätsklasse* zusammengefaßt. Im Anhang A.1 sind die kritischen Exponenten von den drei Universalitätsklassen aufgeführt, die in der QCD von Interesse sind. Die Universalitätshypothese hat sich bewährt und gilt nach der Entwicklung der Renormierungsgruppe non K. Wilson, auf die in Kapitel 1.5 noch genauer eingegangen wird, praktisch als bewiesen.

1.4 Skalengesetze

Es zeigt sich, daß die kritischen Exponenten nicht alle unabhängig voneinander sind. Aus der Thermodynamik lassen sich Ungleichungen zwischen ihnen Ableiten, wie z.B.

$$\begin{array}{rcll} \alpha' + 2\beta + \gamma' & \geq & 2 & \textit{(Rushbrooke-Ungleichung)} \\ \alpha' + \beta(1+\delta) & \geq & 2 & \textit{(Griffiths-Ungleichung)} \\ \gamma' & \geq & \beta(\delta - 1). & \textit{(Widom-Ungleichung)} \end{array} \tag{1.18}$$

Diese Ungleichungen können aber sogar als Gleichungen abgeleitet werden, wenn man für den singulären Anteil der freien Energie die Annahme einer verallgemeinerten homogenen Funktion macht, d.h.

$$\mathcal{F}_s(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h) = \lambda \mathcal{F}_s(t,h) \qquad \forall\ \lambda \in \mathbb{R}. \tag{1.19}$$

Dies wird als *Skalenhypothese* bezeichnet, und ist eine mathematische Konsequenz der Annahme, daß es im System nur die Längenskala ξ gibt. Also ist die divergierende Korrelationslänge die Ursache für alle anderen Singularitäten. Mit Hilfe von (1.19) folgt für den Ordnungsparameter nun

$$\begin{aligned} \phi(t,h) &\propto \frac{\partial \mathcal{F}_s(t,h)}{\partial h} = \lambda^{a_h - 1} \frac{\partial \mathcal{F}_s(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h)}{\partial(\lambda^{a_h} h)} \\ &\propto \lambda^{a_h - 1}\, \phi(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h). \end{aligned} \tag{1.20}$$

Für $h = 0$ und $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$ erhält man

$$\phi(t,0) \propto (-t)^{(1-a_h)/a_t} \phi(-1,0) \quad \Longrightarrow \quad \beta = (1-a_h)/a_t, \tag{1.21}$$

[3]Bisher wurden nur skalare Ordnungsparameter betrachtet. Der Ordnungsparameter kann aber genau so gut Betrag eines n-dimensionalen Vektors sein, oder eine seiner Komponenten. Dies ist z.B. im $O(2)$- und $O(4)$-Spin-Modell der Fall. Die Spindimensionalität n ist unabhängig von der Raumdimension d.

und für $t = 0$ und $\lambda = h^{-1/a_h}$

$$\phi(0,h) \propto h^{(1-a_h)/a_h}\phi(0,1) \quad \Longrightarrow \quad \delta = a_h/(1-a_h). \tag{1.22}$$

Weiter kann man aus (1.19) für die Suszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi(t,h) &\propto \frac{\partial\phi(t,h)}{\partial h} = \lambda^{2a_h-1}\,\frac{\partial\phi(\lambda^{a_t}t,\lambda^{a_h}h)}{\partial(\lambda^{a_h}h)} \\ &\propto \lambda^{2a_h-1}\,\chi(\lambda^{a_t}t,\lambda^{a_h}h) \end{aligned} \tag{1.23}$$

ableiten. Hier erhält man für $h = 0$ und $\lambda = (\pm t)^{(-1/a_t)}$

$$\chi(t,0) \propto (\pm t)^{(1-2a_h)/a_t}\chi(\pm 1,0) \quad \Longrightarrow \quad \gamma = \gamma' = (2a_h-1)/a_t. \tag{1.24}$$

Aus (1.21),(1.22) und (1.24) bekommt man nun die Widom-Ungleichung als Gleichung

$$\gamma = \beta(\delta - 1). \tag{1.25}$$

Die Gleichungen zwischen den Exponenten heißen *Skalengesetze*. Auf diese Weise lassen sich auch alle anderen Exponenten auf a_t und a_h zurückführen. Es gibt also nur zwei unabhängige Exponenten und noch eine ganze Reihe von Skalengesetzen. Insbesondere läßt sich zeigen, daß für den kritischen Exponenten ν

$$\nu = \frac{1}{a_t d} \tag{1.26}$$

gilt, wobei d die Raumdimension ist.

1.5 Die Renormierungsgruppe

Um die Zustandsgleichung eines thermodynamischen Systems bestimmen zu können muß zuerst die Zustandssumme berechnet werden, in der jegliche Information enthalten ist. Diese wird meistens durch ein Pfadintegral ausgedrückt oder in der Impulsraum-Darstellung durch ein Produkt über alle Moden ϕ_q

$$Z = \int \mathcal{D}\phi\ \exp(-\mathcal{F}\{\phi\}/T) \quad = \quad \prod_q \int \frac{d\phi_q}{\sqrt{2\pi V}}\exp(-\mathcal{F}\{\phi\}/T), \tag{1.27}$$

wobei die Moden ϕ_q definiert sind durch die Fouriertransformation

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_q \phi_q e^{i\mathbf{qr}}. \tag{1.28}$$

Die Idee der Renormierungsgruppe (RG) ist es, die Zustandssumme (1.27) in iterierten Schritten zu berechnen, indem Freiheitsgrade mit einem Abstand r, der wesentlich kleiner ist als die Korrelationslänge ξ des Systems, ausintegriert werden. In einem diskretisiertem Ortsraum kann man sich dies durch die *Kadanoff-Konstruktion* veranschaulichen.

Kadanoff [3] befaßte sich 1966 mit dem Ising-Modell, in dem klassische Spinfreiheitsgrade, welche die Werte $s_i \in \{-1, +1\}$ annehmen können, auf einem kubischen Gitter mit dem Gitterabstand a verteilt sind. Die Wechselwirkungen der Spins wird durch eine einzige Wechselwirkungskonstante K beschrieben, die die Wechselwirkung der nächsten Nachbarn vermittelt. Kadanoff unterteilte das System in Blöcke, d.h. Würfel der Länge na, wobei $na \ll \xi$. Mit den Spins dieser Blöcke wird nach einer vorher festgelegten Vorschrift ein neuer Spin, repräsentativ für diesen Block, gebildet. Die Wechselwirkung dieser neuen Blockspins wird durch die Wechselwirkungskonstante K' vermittelt, die eine Funktion der alten Kopplung ist

$$K' = f(K). \tag{1.29}$$

Die Zustandssumme muß aufgrund der Reduktion an Freiheitsgraden mit n^d normalisiert und der Gitterabstand $a' = na$ wieder auf a kontrahiert werden, so daß das Ausgangsproblem wieder vorliegt. Durch die Kontraktion ändert sich die Korrelationslänge, es gilt

$$\xi(K') \equiv \xi(f(K)) = \xi(K)/n. \tag{1.30}$$

Befindet sich das System am kritischen Punkt mit der endlichen kritischen Kopplung K_c aber einer divergenten Korrelationslänge ξ, dann erfüllt die Funktion f die Bedingung

$$K_c = f(K_c), \tag{1.31}$$

d.h. der kritischen Punkt ist ausgezeichnet durch den Fixpunkt der Kadanoff Blockspintransformation (1.29). Dort sind alle Skalen gleichwertig und man spricht von einer *Skaleninvarianz* des Systems. Durch diese Konstruktion gelang es Kadanoff 1966, die Skalenhypothese (1.19) zu motivieren.

Eine mathematisch fundiertere Version der Renormierungsgruppe wurde 1971 von Wilson [4] geliefert. Die Blockspintransformation ist physikalisch eine Vergröberung des Auflösungsvermögens im Ortsraum, was der Einführung eines "cut-offs" Λ im Impulsraum entspricht, bzw. das Verringern von Λ um $\delta\Lambda$ entspricht einer infinitesimalen Transformation. Das Prinzip ist das folgende

$$\begin{aligned} \Lambda \quad &\longrightarrow \quad \Lambda' = \Lambda(1-\delta) \\ \mathcal{H}\{\phi_q\} \quad &\longrightarrow \quad \mathcal{H}'\{\phi_q\} = -\ln\left\{ \prod_{\Lambda(1-\delta)<q<\Lambda} \int \frac{d\phi_q}{\sqrt{2\pi V}} \exp(-\mathcal{H}\{\phi_q\}) \right\}, \end{aligned} \tag{1.32}$$

wobei der "Hamiltonian" $\mathcal{H}$ definiert ist als $\mathcal{H} = \mathcal{F}/T$. Der neue Hamiltonian enthält nun keine Moden mehr mit $q > \Lambda(1-\delta)$, so daß ein Teil der Information von $\phi(\mathbf{r})$ für kleine Abstände verloren ist. Die Zustandssumme läßt sich nun umschreiben zu

$$Z = \prod_{q<\Lambda(1-\delta)} \int \frac{d\phi_q}{\sqrt{2\pi V}} \exp(-\mathcal{H}'\{\phi_q\}). \tag{1.33}$$

Das Einführen einer scharfen Grenze Λ führt jedoch zu physikalischen Schwierigkeiten durch die Generierung von nicht-lokalen Wechselwirkungen im Ortsraum. Abhilfe schafft hier Wilsons Formalismus der unvollständigen Integration, mit dem er es schaffte, eine exakte RG-Gleichung in differentieller Form aufzustellen. Unvollständig heißt, daß höhere Moden durch die RG-Transformationen unterdrückt werden aber nicht vollständig verschwinden. Nach unendlich vielen Transformationen erhält man für die Moden eine Gaußverteilung, unabhängig von der ursprünglichen Form des Hamiltonian. Zur Herleitung der Skalenhypothese (1.19) ist die Kenntnis über die explizite Form der RG-Gleichung nicht von Nöten, es reicht zu wissen, daß sie die folgende Form hat

$$\frac{\partial \mathcal{H}(l)}{\partial l} = \hat{R}\{\mathcal{H}(l)\}. \tag{1.34}$$

Dabei ist l ein Maß für die Vergröberung und $\mathcal{H}(0)$ entspricht dem ursprünglichen Hamiltonian. Der Punkt der Skaleninvarianz erfüllt dann die Bedingung

$$\hat{R}\{\mathcal{H}^*\} = 0. \tag{1.35}$$

In der Nähe des Fixpunktes läßt sich die RG-Gleichung linearisieren, d.h. für Abweichungen $\mathcal{H}^* + \Delta\mathcal{H}$ vom Fixpunkt ergibt sich

$$\frac{\partial \Delta\mathcal{H}}{\partial l} = \hat{L}\Delta\mathcal{H} + \hat{L}_n\Delta\mathcal{H}, \tag{1.36}$$

wobei $\hat{L}_n$ ein nicht-linearer Operator ist, und der Term $\hat{L}_n\Delta\mathcal{H}$ für kleine Abweichungen $\Delta\mathcal{H}$ vernachlässigt werden kann. Nimmt man an, daß der lineare Operator $\hat{L}$ einen vollständigen Satz von Eigenvektoren $\mathcal{O}_i$ besitzt mit den Eigenwerten λ_i, so gilt

$$\hat{L}\mathcal{O}_i = \lambda_i\mathcal{O}_i. \tag{1.37}$$

Der Hamiltonian läßt sich mit Hilfe der $\mathcal{O}_i$ um den Fixpunkt linear entwickeln, und man erhält

$$\mathcal{H}(l) = \mathcal{H}^* + \Delta\mathcal{H}(l) = \mathcal{H}^* + \sum_i \mu_i(l)\mathcal{O}_i. \tag{1.38}$$

Die Koeffizienten $\mu_i(l)$ werden *Skalenvariablen* oder *Skalenfelder* genannt und erfüllen die Bedingung

$$\frac{\partial \mu_i(l)}{\partial l} = \lambda_i\mu_i(l). \tag{1.39}$$

Die Differentialgleichung (1.39) kann man lösen und (1.38) als

$$\mathcal{H}(l) = \mathcal{H}^* + \sum_i \mu_i e^{\lambda_i l}\mathcal{O}_i \tag{1.40}$$

schreiben. Es ist nun leicht ersichtlich, daß ein Fixpunkt für Eigenvektoren mit einem Eigenwert $\lambda_i > 0$ nur erreicht werden kann, wenn die zugehörige Skalenvariable μ_i auf 0 fixiert wird. Die Skalenvariablen lassen sich daher nach den Eigenwerten λ_i klassifizieren:

1. relevante Skalenvariable mit $\lambda_i > 0$,
2. irrelevante Skalenvariable mit $\lambda_i < 0$,
3. marginale Skalenvariable mit $\lambda_i = 0$.

Dies läßt sich auch in einem RG-Flußdiagramm veranschaulichen, wie dies in Abbildung 1.3 für eine relevante Skalenvariable μ_1 und eine irrelevante Skalenvariable μ_2 gezeigt wird. Man sieht deutlich, daß man nur in den Fixpunkt laufen kann, wenn man bei $\mu_1 = 0$ startet, alle anderen Fälle führen zu $\mu_1 = \pm\infty$. In der μ_2-Richtung erreicht man dagegen immer den Fixpunkt $\mu_2 = 0$. Viele Systeme haben zwei relevante Skalenvariable, die reduzierte Temperatur t und ein reduziertes äußeres Feld h. In diesem Fall kann man den Hamiltonian schreiben als

$$\mathcal{H}(t, h, \mu_i) = \mathcal{H}^* + t\mathcal{O}_t + h\mathcal{O}_h + \sum_i \mu_i \mathcal{O}_i. \tag{1.41}$$

Ein Eigenvektor spielt jedoch eine besondere Rolle, das Volumen $\mathcal{O}_0 = V$ mit $\lambda_0 = d$. Unter einer RG-Transformation kontrahiert sich das Volumen wie

$$V(l) = e^{-dl} V(0). \tag{1.42}$$

Die zugehörige Skalenvariable μ_0 wächst jedoch mit

$$\mu_0(l) = e^{dl} \mu_0(0). \tag{1.43}$$

Als Konsequenz bleibt das Produkt

$$\mu_0(l)V(l) = \mu_0(0)V(0) \tag{1.44}$$

konstant und trägt nichts zum kritischen Verhalten des Systems bei. Die freie Energie

$$\mathcal{F} = -T \ln Z \tag{1.45}$$

ist als Logarithmus der Zustandssumme eine Konstante, doch aus dem Verhalten des Volumens unter den RG-Transformationen läßt sich das Transformationsverhalten der freien Energiedichte f ableiten, es muß gelten

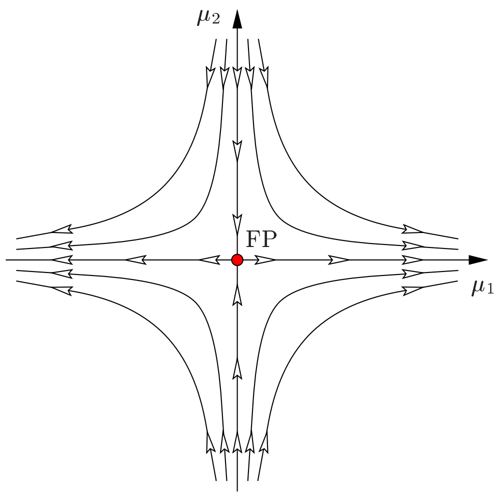


Abbildung 1.3: *RG Flußdiagramm für eine relevante Skalenvariable μ_1 und eine irrelevante Skalenvariable μ_2.*

$$\mathcal{F} = f(0)V(0) = f(l)V(l), \tag{1.46}$$

daraus folgt sofort, daß f transformiert wie die Skalenvariable μ_0 nämlich

$$f(l) = e^{dl} f(0) \tag{1.47}$$

Da der Hamiltonian die Form $\mathcal{H}(l) = \mathcal{H}^* + \Delta\mathcal{H}\Big(te^{\lambda_t l}, he^{\lambda_h l}, \mu_i e^{\lambda_i l}\Big)$ besitzt, gilt

$$f\Big(t, h, \mu_i\Big) = e^{-dl} f\Big(te^{\lambda_t l}, he^{\lambda_h l}, \mu_i e^{\lambda_i l}\Big), \tag{1.48}$$

bzw. nach der expliziten Abspaltung des regulären Anteils, der von der Konstante $\mu_0(l)V(l)$ herrührt,

$$f\Big(t, h, \mu_i\Big) = \mu_0 + e^{-dl} f_s\Big(te^{\lambda_t l}, he^{\lambda_h l}, \mu_i e^{\lambda_i l}\Big). \tag{1.49}$$

Damit ist die Skalenhypothese (1.19) bewiesen. Dem Skalenfaktor λ aus (1.19) entspricht hier e^{dl}.

1.6 Endliche Volumeneffekte

1.6.1 Finite Size Scaling (FSS)

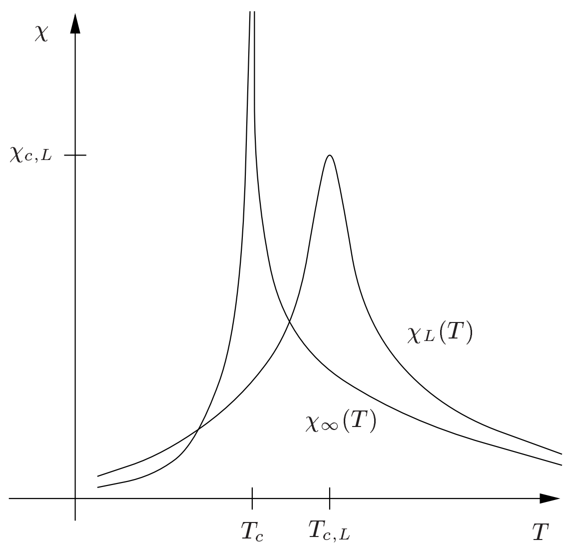


Abbildung 1.4: *Endliche Volumeneffekte der Suszeptibilität.*

In einem System endlicher Größe kann die Korrelationslänge nicht divergieren, daher sind auch alle anderen Divergenzen abgerundet und verschoben (siehe Abbildung 1.4). Diese Effekte bezeichnet man als *endliche Volumeneffekte*. Der Punkt $y_{c,L}$ im Raum der Zustandsvariablen, an dem ein System mit der endlichen Länge L solche "abgerundeten Divergenzen" aufweist, wird auch *pseudokritischer Punkt* genannt.

Wie oben bereits gesehen, ist das Volumen V ein Eigenvektor der RG-Transformation. Betrachtet man ein System mit endlichem Volumen

$$V = L^d, \tag{1.50}$$

so läßt sich die Skalenhypothese in der Form (1.19) erweitern zu

$$\mathcal{F}_s(t, h, V^{-1}) = \lambda^{-1}\mathcal{F}_s(\lambda^{a_t}t, \lambda^{a_h}h, \lambda V^{-1}). \tag{1.51}$$

Für die Suszeptibilität ergibt sich daraus analog zu (1.23) das Transformationsverhalten

$$\chi(t, h, V^{-1}) \propto \lambda^{2a_h-1}\, \chi(\lambda^{a_t}t, \lambda^{a_h}h, \lambda V^{-1}). \tag{1.52}$$

Mit $t = h = 0$, $\lambda = L^d$ und den Relationen für γ (1.24) und ν (1.26) ergibt sich für das Maximum der Suszeptibilität

$$\chi_{c,L} \propto L^{\gamma/\nu}. \tag{1.53}$$

Um die Verschiebung in der kritischen Temperatur zu untersuchen, betrachtet man die Ableitung der Suszeptibilität (1.52) nach der reduzierten Temperatur. Diese muß am pseudokritischen Punkt verschwinden, und man erhält

$$\frac{\partial\chi(t, h, V^{-1})}{\partial t} \propto L^{(\gamma+1)/\nu}\tilde{\chi}(L^{1/\nu}t, 0, 1) = 0. \tag{1.54}$$

Angenommen $z_0 = L^{1/\nu}t_{c,L}$ ist Nullstelle von $\tilde{\chi}(L^{1/\nu}t)$, dann gilt

$$t_{c,L} = \left|\frac{T_{c,L} - T_c}{T_c}\right| = z_0 L^{-1/\nu} \qquad \Longrightarrow \qquad T_{c,L} = T_c + cL^{-1/\nu}. \tag{1.55}$$

Der entscheidene Punkt bei der FSS-Methode ist, daß die inverse Systemlänge L^{-1} auf eine Stufe mit den übrigen relevanten Skalenvariablen gestellt wird. Man erhält so die Möglichkeit, durch Computersimulation endlicher Systeme kritische Exponenten des unendlichen

Systems zu bestimmen. Man darf jedoch nicht vergessen, daß die Skalenhypothese (1.19) und damit auch (1.51) nur am kritischen Punkt gelten. Befindet man sich nicht genau am kritischen Punkt, erhält man immer Korrekturen durch irrelevante Skalenvariablen (*corrections to scaling*). Liegt ein Phasenübergang erster Ordnung vor, so zeigt eine FSS-Analyse, daß die Observablen nur auf Grund des Volumes skalieren. Man erhält (siehe z.B. [5]) analog zu (1.53) und (1.55)

$$\begin{aligned} \chi_{u,L} &\propto L^d && (1.56)\\ |T_{u,L} - T_u| &\propto L^{-d}. && (1.57) \end{aligned}$$

Betrachtet man das Transformationsverhalten der partiellen Ableitungen des singulären Teils der freien Energiedichte noch etwas genauer, lassen sich *RG-Invarianten* oder *Kumulanten* definieren. Mit

$$\begin{aligned} M_{k,j} &\equiv \frac{\partial^k}{\partial \mu_j^k} \mathcal{F}_s(\mu_j, V^{-1}) \\ &= \lambda^{k a_j - 1} \tilde{\mathcal{F}}_{sj}^{(k)}(\lambda^{a_j}\mu_j, \lambda V^{-1}) \\ &= L^{(k a_j - 1)d} f_j^{(k)}(L^{d a_j}\mu_j) \qquad (\lambda \equiv L^d) \qquad (1.58) \end{aligned}$$

ist das Verhältnis

$$B_{k,j} \equiv L^{-d} \frac{M_{2k,j}}{(M_{k,j})^2} = \frac{f_j^{(2k)}(L^{d a_j}\mu_j)}{(f_j^{(k)}(L^{d a_j}\mu_j))^2} \equiv B_{k,j}(L^{d a_j}\mu_j) \qquad (1.59)$$

nur noch eine Funktion der universellen Variablen $z_j = L^{d a_j}\mu_j$. Insbesondere gilt

$$B_{l,j}(0) = B_{m,j}(0) \qquad \forall \quad l, m. \qquad (1.60)$$

1.6.2 Verteilung der Observablen

Auch für die Wahrscheinlichkeitsdichten der Observablen lassen sich Skalenhypothesen aufstellen [6, 7]. Ist der Hamiltonoperator wie in (1.38) durch die Eigenoperatoren $\mathcal{O}_i$ der RG-Transformation dargestellt, so gilt für die Messung der $\mathcal{O}_i$ folgende Skalenannahme ($\mathcal{O}_i \neq \mathcal{O}_0 = V$)

$$p_L(\mathcal{O}_i, \mu_i) = \Lambda_i^+ \tilde{p}_{\mathcal{O}_i}(\Lambda_i^+ \delta\mathcal{O}_i, \Lambda_i \mu_i), \qquad (1.61)$$

wobei

$$\Lambda_i = c_i L^{y_i}, \qquad \Lambda_i^+ \Lambda_i = \Lambda_i \Lambda_i^+ = L^d \qquad (1.62)$$

und

$$\delta\mathcal{O}_i = \mathcal{O}_i - \langle \mathcal{O}_i \rangle. \qquad (1.63)$$

Die Verteilung der $\mathcal{O}_i$ am kritischen Punkt ist universell [8] und durch die Funktion $\tilde{p}^*_{\mathcal{O}_i}(x) = \tilde{p}_{\mathcal{O}_i}(x, 0)$ gegeben. Damit ergibt sich noch eine weitere Möglichkeit, die Universalitätsklasse unabhängig von den kritischen Exponenten zu bestimmen, indem man die Verteilung der relevanten Operatoren am kritischen Punkt auswertet. In der Universalitätsklasse des $3d$-Ising-Modells, so wie in jenen des $3d$-$O(2)$- und $3d$-$O(4)$-Modells, gibt es die zwei relevanten Operatoren $\mathcal{O}_t$ und $\mathcal{O}_h$ zu den Skalenvariablen t und h. Sie werden im folgenden Energie $\mathcal{E}$ und Magnetisierung $\mathcal{M}$ genannt. Die universelle Verteilung $\tilde{p}^*_{\mathcal{M}}(x)$ der Ising-Universalitätsklasse hat die Form [9]

$$\tilde{p}^*_{\mathcal{M}}(x) \propto \exp\left\{ -\left(\frac{x^2}{m_0^2} - 1\right)^2 \left(a\frac{x^2}{m_0^2} + b\right) \right\}, \tag{1.64}$$

wobei m_0 die Position des Magnetisierungs Peaks ist, und a und b zwei universelle Konstanten mit den Werten

$$a = 0.157(2), \qquad b = 0.776(2). \tag{1.65}$$

Bewegt man sich vom kritischen Punkt weg, variiert die Verteilung zwischen zwei Extrema, nämlich einem einfachen Gauß-Peak und zwei separierten Gauß-Peaks, wie in Abbildung 1.5 dargestellt. Das ist wie folgt zu verstehen: Für $t \gg 0$ ist die Potential-Barriere zwischen den zwei geordneten Phase klein gegenüber den thermischen Fluktuationen. Die $\mathcal{M}$-Verteilung ist um den Ursprung annähernd normalverteilt. Das System durchläuft in h-Richtung keinen Phasenübergang, man spricht von einem *Crossover*. Für $t \ll 0$ ist die Potential-Barriere zwischen den Phasen groß gegenüber den thermischen Fluktuationen, und für $h = 0$ kann das System von der einen in die andere Phase springen. Das System vollführt hier einen Phasenübergang erster Ordnung, und es kommt so zu je einem Gauß-Peak für die zwei geordneten Phasen. Man findet in der Regel auch eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit zwischen den beiden Peaks. Dort wird das System von einer gemischten Phase dominiert, d.h. es gibt sowohl Bereiche der einen wie der anderen geordneten Phase, die durch eine Oberfläche voneinander getrennt sind. Eine Methode zur Untersuchung der Oberflächenspannung σ findet sich in [10]. Man teilt die gesamte Verteilung $p_{\mathcal{M}}(x)$ auf in die Verteilung der geordneten Phase mit einer positiven Magnetisierung $p^{(+)}_{\mathcal{M}}(x)$, in die Verteilung der geordneten Phase mit einer negativen Magnetisierung $p^{(-)}_{\mathcal{M}}(x)$ und in die Verteilung der gemischten Phase $p^{(m)}_{\mathcal{M}}(x)$, wobei

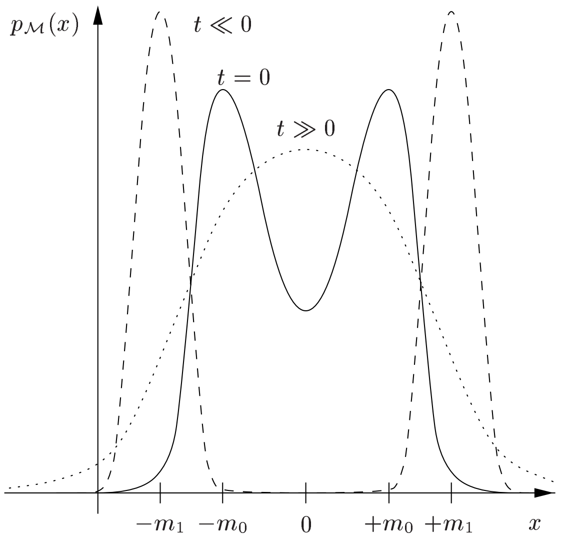


Abbildung 1.5: *Schematische Darstellung der $\mathcal{M}$-Verteilung für $t \ll 0$, $t = 0$ und $t \gg 0$, jeweils bei $h = 0$, wobei $x \propto \delta\mathcal{M}$.*

$$p_{\mathcal{M}}(x) = p^{(+)}_{\mathcal{M}}(x) + p^{(-)}_{\mathcal{M}}(x) + p^{(m)}_{\mathcal{M}}(x) \tag{1.66}$$

gilt. Für die einzelnen Verteilungen bei $t = 0$ gibt es die folgenden Ansätze

$$p^{(-)}_{\mathcal{M}}(x) = p^{(+)}_{\mathcal{M}}(-x) \propto \exp\left\{ -\frac{1}{k_B T} f^{(+)} V \right\} \cdot \exp\left\{ -(x - m_1)^2 \right\} \tag{1.67}$$

und

$$p_{\mathcal{M}}^{(m)}(x) \propto \exp\left\{-\frac{1}{k_B T}\left(f^{(+)}V^{(+)} + f^{(-)}V^{(-)} + \sigma A\right)\right\} \tag{1.68}$$

mit $f^{(-)} = f^{(+)}$ als freie Energie für die beiden geordneten Phasen (Gleichheit gilt nur bei $h = 0$), $V^{(-)}$ bzw. $V^{(+)}$ als Volumen der beiden Phasen und A als Fläche, die beide Phasen trennt. Es gilt

$$V = \gamma^{(-)}V^{(-)} + \gamma^{(+)}V^{(+)} \qquad \text{mit} \qquad \gamma^{(-)} + \gamma^{(+)} = 1. \tag{1.69}$$

Aus (1.67), (1.68) und (1.69) ergibt sich schließlich

$$\frac{p_{\mathcal{M}}(0)}{p_{\mathcal{M}}(-m_1)^{\gamma^{(-)}} p_{\mathcal{M}}(m_1)^{\gamma^{(+)}}} \propto \exp\left\{-\frac{1}{k_B T}\sigma A\right\}. \tag{1.70}$$

Die Oberflächenspannung ist auch ein Indikator für den kritischen Punkt, da sie dort verschwindet.

In der Praxis hat man das Problem, daß in Systemen mit endlicher Länge immer die Möglichkeit des Tunnelns von einer geordneten Phase in die andere besteht. Man definiert daher den Ordnungsparameter als Betrag der Magnetisierung $\phi = \langle|\mathcal{M}|\rangle$, was jedoch den Nachteil mit sich bringt, daß auch in der ungeordneten Phase der Ordnungsparameter nicht verschwindet. Auch die gemeinsamen $\mathcal{EM}$-Verteilungen sind am kritischen Punkt universell. Sie sind für die drei Universalitätsklassen im Anhang A.2 dargestellt.

Kapitel 2

Phasenübergänge in der QCD

In der statistischen Physik sind Phasenübergänge im allgemeinen auf globale Symmetrien des Hamilton-Operators oder der Lagrangefunktion zurückzuführen, die beim Phasenübergang spontan gebrochen bzw. restauriert werden. In diesem Kapitel wird die Lagrangefunktion der QCD eingeführt und deren Symmetrien diskutiert. Einige von diesen können in der Tat mit dem Auftreten von QCD-Phasenübergängen in Verbindung gebracht werden. Schließlich wird noch das Phasendiagramm der QCD skizziert.

2.1 Symmetrien und Phänomene der QCD

Die QCD ist eine Quantenfeldtheorie, die durch wenige sehr allgemeine Postulate festgelegt ist. Dies geschieht zum Einen durch die generellen Postulate einer Quantenfeldtheorie, die relativistisch, lokal und renormierbar sein muß und zum Anderen durch die Festlegung der lokalen Eichgruppe auf $SU(N_c = 3)$. Damit ist die Lagrangedichte der QCD bestimmt als

$$\mathcal{L}(x) = \underbrace{-\frac{1}{4}F^a_{\mu\nu}(x)F^{a\ \mu\nu}(x)}_{\mathcal{L}_G(x)} + \underbrace{\bar{\psi}^f(x)(i\gamma^\mu D_\mu(A) - m_f)\psi^f(x)}_{\mathcal{L}_F(x)} . \tag{2.1}$$

Dabei ist $\mathcal{L}_G(x)$ der gluonische und $\mathcal{L}_F(x)$ der fermionische Anteil der Lagrangedichte. Der gluonische Anteil wird wie in der QED aus dem Feldstärketensor $F^a_{\mu\nu}(x)$ gebildet. Dieser besitzt jedoch auf Grund des nicht-abelschen Charakters der $SU(3)$ einen zusätzlichen Term, welcher proportional zu der Kopplungskonstanten g und den Strukturkonstanten f^{abc} der Eichgruppe ist, wodurch die Selbstwechselwirkung der Gluonen erzeugt wird

$$F^a_{\mu\nu}(x) \equiv \partial_\mu A^a_\nu(x) - \partial_\nu A^a_\mu(x) + g f^{abc} A^b_\mu(x) A^c_\nu(x). \tag{2.2}$$

$A^a_\mu(x)$ bezeichnet die Gluonfelder. In der fundamentalen Darstellung der $SU(3)$ treten acht Gluonen ($a = 1, \ldots, 8$) auf. Im fermionischen Anteil bezeichnet γ^μ die vier Dirac-Matrizen, und die Quarkfelder ψ_μ^{fc} ($f = 1, \ldots, N_f$; $c = 1, \ldots, 3$) sind durch den Formalismus der minimalen Substitution an die Gluonfelder gekoppelt. Dabei wird die kovariante Ableitung

$$D_\mu(A) \equiv \partial_\mu - ig\; T^a A_\mu^a(x) \tag{2.3}$$

eingeführt mit T^a als Generatoren der $SU(3)$. Desweitern steht im fermionischen Anteil noch ein zu den Quarkmassen m_f proportionaler Massenterm. Zur Abkürzung setzt man häufig

$$A_\mu(x) = -igA_\mu^a(x)T^a \qquad \text{und} \qquad F_{\mu\nu}(x) = -igF_{\mu\nu}^a(x)T^a. \tag{2.4}$$

Die Felder $A_\mu(x)$ und $F_{\mu\nu}(x)$ sind spurlose antihermitsche $(N_c \times N_c)$-Matrizen im Farb-Raum. Damit gilt für den gluonischen Anteil der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_G = \frac{1}{2g^2} \mathrm{Tr}\, F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \tag{2.5}$$

Die experimentell zu bestimmenden Konstanten, die nicht durch Postulate festgelegt sind, sind die Zahl der Farbladungen $N_c = 3$ sowie die Zahl der Fermionen N_f mit den Massen m_f. In der Natur gibt es sechs verschiedene Quarks, $N_f = 6$, doch in der Praxis beschränkt man die Zahl der Quarkflavour meist auf zwei oder drei, da die drei sehr schweren Quarks charm, bottom und top erst bei sehr hohen Energiedichten relevant werden.

Vernachlässigt man in dieser klassischen Lagrangedichte die Quarkmassen m_f, so lassen sich in ihr viele Symmetrien ausmachen. Ihre Symmetriegruppe ist ein Produkt aus den folgenden Symmetrien (siehe z.B. [11])

$$\mathcal{G}_{klass.}^{(m=0)} = SU(3)_C \times SU(N_f)_L \times SU(N_F)_R \times U(1)_B \times U(1)_A \times \mathcal{R}^+_{scale}. \tag{2.6}$$

Hinzu kommt noch die Poincare Invarianz, sowie Paritätserhaltung, Ladungkonjugation und Zeitumkehrinvarianz. Die Faktoren im Einzelnen sind folgende:

$SU(3)_C$ ist die lokale Farb-Symmetrie. Nach Konstruktion der QCD als lokale Eichtheorie bleibt die Lagrangedichte invariant unter den Transformationen

$$\begin{aligned} \psi_\mu^{fc}(x) &\longrightarrow \psi_\mu'^{fc}(x) = U^{cd}(x)\; \psi_\mu^{fd}(x) \qquad\qquad U(x) \in SU(3) \\ \bar\psi_\mu^{fc}(x) &\longrightarrow \bar\psi_\mu'^{fc}(x) = \bar\psi_\mu^{fd}(x)\; U^{\dagger dc}(x) \\ A_\mu(x) &\longrightarrow A_\mu'(x) = U(x)A_\mu(x)U^\dagger(x) + U(x)\left(\partial_\mu U^\dagger(x)\right) \end{aligned} \tag{2.7}$$

$SU(N_f)_L$ ist die linkshändige chirale Flavour-Symmetrie. Die Lagrangedichte bleibt invariant unter speziellen unitären Transformationen auf linkshändige Spinoren (siehe Kapitel 2.3).

$SU(N_f)_R$ ist analog die rechtshändige chirale Flavour-Symmetrie. Die Lagrangedichte bleibt invariant unter speziellen unitären Transformationen auf rechtshändige Spinoren.

$U(1)_B$ bezieht sich auf die Baryonzahlerhaltung. Sie erlaubt die Wahl einer beliebiegen Phase für die Quarkfelder.

$$\begin{array}{lcll} \psi(x) & \longrightarrow & \psi'(x) = e^{+i\varphi}\psi(x) & \qquad \varphi \in [0, 2\pi] \\ \bar{\psi}(x) & \longrightarrow & \bar{\psi}'(x) = e^{-i\varphi}\bar{\psi}(x) & \end{array} \tag{2.8}$$

$U(1)_A$ ist ferner die axiale Baryonzahlerhaltung, und gewährt die Freiheit einer beliebiegen Phase der Quarkfelder mit verschiedenem Vorzeichen für linkshändige und rechtshändige Spinoren.

$$\begin{array}{lcll} \psi_L(x) & \longrightarrow & \psi'_L(x) = e^{+i\varphi}\psi_L(x) & \qquad \varphi \in [0, 2\pi] \\ \bar{\psi}_L(x) & \longrightarrow & \bar{\psi}'_L(x) = e^{-i\varphi}\bar{\psi}_L(x) & \\ \psi_R(x) & \longrightarrow & \psi'_R(x) = e^{-i\varphi}\psi_R(x) & \\ \bar{\psi}_R(x) & \longrightarrow & \bar{\psi}'_R(x) = e^{+i\varphi}\bar{\psi}_R(x) & \end{array} \tag{2.9}$$

$\mathcal{R}^+_{scale}$ beschreibt die Skaleninvarianz. Der einzige Parameter der masselosen Theorie g ist dimensionslos in Einheiten $\hbar = c = 1$. Daher bleibt die Wirkung $S = \int d^4x\ \mathcal{L}[\psi, \bar{\psi}, A]$ invariant unter

$$\begin{array}{rcll} x^\mu & \longrightarrow & x'^\mu = \lambda x^\mu & \qquad \lambda \in \mathbb{R} \\ \psi(x) & \longrightarrow & \psi'(x) = \lambda^{-1}\psi(x) & \\ \bar{\psi}(x) & \longrightarrow & \bar{\psi}'(x) = \lambda^{-1}\bar{\psi}(x) & \\ A(x) & \longrightarrow & A'(x) = \lambda^{-1}A(x). & \end{array} \tag{2.10}$$

Nach der Quantisierung der klassischen Feldtheorie (z.B. durch den Formalismus der Pfadintegral Quantisierung) und der Regularisierung virtueller Quantenfluktuationen gehen einige Symmetrien verloren. Die Skaleninvarianz verschwindet, was sich in einer *laufenden Kopplung* niederschlägt. Eine der ersten Konsequenzen einer Quantenfeldtheorie mit dem Konzept von virtuellen Teilchenwolken ist es, dem Vakuum Mediumeigenschaften zuzuschreiben. Dadurch kommt es zu Abschirmeffekten, welche die effektive Kopplung vom Abstand abhängig machen. So definiert die Kopplung eine Längenskala bzw. eine inverse Energieskala. In der Tat kommt es aufgrund von paramagnetischen Eigenschaften des Vakuums zu Anti-Abschirmeffekten, so daß sich die Quarks für sehr kleine Abstände bzw. sehr hohe Energien quasi frei bewegen (*asymptotische Freiheit*). Ferner wird die $U(1)_A$ auf die Untergruppe $Z(N_f)_A$ heruntergebrochen (*chirale Anomalie*). So ist die Symmetriegruppe der Quantentheorie auf

$$\mathcal{G}^{(m=0)}_{quant.} = SU(3)_C \times SU(N_f)_L \times SU(N_F)_R \times U(1)_B \times Z(N_f)_A \tag{2.11}$$

reduziert. Im Grundzustand reduziert sich die Symmetrie aufgrund von spontaner Symmetriebrechung weiter.

2.2 Der Deconfinement-Phasenübergang

2.2.1 Reine $SU(3)$-Eichtheorie

Der Limes der reinen Eichtheorie (*quenched Limes* der QCD) wird erreicht, in dem man entweder die Anzahl der Quarkflavour gegen Null ($N_f \to 0$) oder die Quarkmassen gegen unendlich ($m_f \to \infty$) gehen läßt. Die Lagrangedichte reduziert sich dann auf den gluonischen Anteil, d.h. $\mathcal{L}(x) = \mathcal{L}_G(x)$. Physikalisch wird so ein reines Gluon-Vakuum beschrieben, indem virtuelle Quarkloops unterdrückt sind. Führt man die *Wick Rotation* durch ($t \to -i\tau,\ A_0(t,\mathbf{x}) \to -iA_4^E(\mathbf{x},\tau)$) und geht zu der euklidischen Wirkung S^E über, so findet man in der euklidischen Pfadintegralformulierung ein Analogon zur statistischen Physik. Der Faktor $\exp\{-S^E\}$ kann als Boltzmann-Faktor interpretiert werden, und eine Temperatur T durch periodische Randbedingungen in der imaginären Zeit τ eingeführt werden. Es ergibt sich die Zustandssumme

$$Z = \int\limits_{\substack{A_\mu(\mathbf{x},\beta) \\ = A_\mu(\mathbf{x},0)}} \mathcal{D}A \ \exp\left\{-S_G^E[A]\right\} = \int\limits_{\substack{A_\mu(\mathbf{x},\beta) \\ = A_\mu(\mathbf{x},0)}} \mathcal{D}A \ \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \int d^3x \ \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ \left(F_{\mu\nu}^E\right)^2\right\}, \quad (2.12)$$

mit $\beta = 1/T$. Der Index E für euklidisch wird ab jetzt unterdrückt. Durch die Einführung der periodischen Randbedingungen erhält man eine weitere Symmetrie. Da in der Zustandssumme nur über periodische Eichfelder integriert wird, sind auch nur solche Eichtransformationen zulässig, die die Periodizität der Eichfelder nicht ändern. Man stellt jedoch fest, daß Eichtransformationen, die bis auf ein Element des Zentrums $\mathcal{Z}$ der $SU(3)$ periodisch sind, die Wirkung nicht verändern. Für solche verallgemeinerten Eichtransformationen gilt

$$U(\mathbf{x},0) = c\ U(\mathbf{x},\beta) \qquad U(x) \in SU(3), \quad (2.13)$$

mit

$$c \in \mathcal{Z}(SU(3)) = \left\{ e^{i\frac{2\pi}{3}n}\mathbb{1} \ \middle|\ n = 1,\ldots,3 \right\}. \quad (2.14)$$

Da die Elemente des Zentrums mit allen anderen Elementen der Gruppe vertauschen, bleibt nicht nur die Wirkung, sondern auch alle anderen topologisch trivialen Terme der Eichfelder invariant. Nur Terme, die in der Zeitrichtung periodisch geschlossen sind, transformieren, wie z.B. der *Polyakov-Loop*, definiert als

$$L(\mathbf{x}) \equiv \mathrm{Tr}\,\mathrm{P}\exp\left\{\int_0^\beta d\tau\ A_4(\mathbf{x},\tau)\right\} \quad (2.15)$$

mit P als Zeichen für pfadgeordnet. Der lokale Polyakov-Loop transformiert unter den verallgemeinerten Eichtransformationen (2.13) wie $L(\mathbf{x}) \longrightarrow cL(\mathbf{x})$ mit $c \in Z(3)$. Betrachtet man den Erwartungswert $\langle L\rangle$ des Polyakov-Loops in Abhängigkeit der Temperatur T, so stellt man fest, daß das Gluon-Vakuum die $Z(3)$-Symmetrie der Wirkung bis zu einer

Übergangstemperatur T_u teilt. Oberhalb von T_u wird diese Symmetrie jedoch spontan gebrochen. $\langle L\rangle$ zeigt das Verhalten

$$\langle L\rangle \equiv \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{x}}\langle L(\mathbf{x})\rangle = \begin{cases} 0, & T < T_u \\ \text{endlich}, & T > T_u. \end{cases} \tag{2.16}$$

Das System vollzieht also bei $T = T_u$ einen Phasenübergang, bei dem der Polyakov-Loop $L(\mathbf{x})$ als lokaler Ordnungsparameter fungiert.

Physikalische Interpretation

Bringt man in das Gluon-Vakuum ein Paar aus einem unendlich schweren Test-Quark und Test-Antiquark, so verharren diese an einem festen Punkt $\mathbf{x}$ bzw. $\mathbf{y}$ im Raum. Ihre Weltlinien sind Geraden in τ-Richtung. Die Kopplung dieser Quarks an das Gluonfeld generiert zwei gegensätzlich gerichtete Polyakov-Loops entlang ihrer Weltlinien. Die Zustandssumme eines solchen Systems ist daher durch

$$Z_{q\bar{q}} = \langle L(\mathbf{x})L^\dagger(\mathbf{y})\rangle = \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}A\; L(\mathbf{x})L^\dagger(\mathbf{y})\; e^{-S_G[A]} \tag{2.17}$$

gegeben, wobei $S_G[A]$ die gluonische Wirkung in (2.12) ist. $Z_{q\bar{q}}$ impliziert für die freie Energie eines statischen Quark-Antiquark-Paares die Relation

$$\exp\left(-\beta\mathcal{F}_{q\bar{q}}(\mathbf{x},\mathbf{y})\right) = \langle L(\mathbf{x})L^\dagger(\mathbf{y})\rangle \underset{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\to\infty}{\longrightarrow} |\langle L\rangle|^2 \tag{2.18}$$

Diese Gleichung spiegelt das Phänomen des *confinement* wider. Aus ihr ist zusammen mit (2.16) ersichtlich, daß für $T < T_u$ die freie Energie $\mathcal{F}_{q\bar{q}}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ mit dem Abstand der Quarks divergiert. Die Trennung des Paares würde unendlich viel Energie benötigen. Zwischen ihnen findet innerhalb einer Flußröhre ein reger Gluonaustausch (Gluon-String) statt. Man sagt, die Farbladungen sind *confined*. Für $T > T_u$ besitzt ein solches Paar nur eine endliche Bindungsenergie, so daß die Trennung möglich wird, und die Flußröhre verschwindet. Das Potential $V_{q\bar{q}}(r)$ zwischen den Quarks kann man einführen, indem man durch den Selbstenergiebeitrag der einzelnen Quarks teilt. Es gilt

$$\exp\left(-\beta V_{q\bar{q}}(r)\right) = \frac{\langle L(\mathbf{x})L^\dagger(\mathbf{y})\rangle}{|\langle L\rangle|^2} \tag{2.19}$$

mit $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| = r$. Neben einem Coulomb-Term $V_{q\bar{q}} \sim -\frac{\alpha}{r}$ für kleine Abstände besitzt das Potential auch einen Term $\sim \sigma r$ für große Abstände. Der Proportionalitätsfaktor σ wird als Saitenspannung (string tension) des Gluon-Strings bezeichnet.

Effektive Wirkung

Um die Untersuchung des Phasenübergangs der reinen (3+1)-dimensionalen $SU(3)$-Eichtheorie zu vereinfachen, kann man eine effektive Theorie in Termen des Ordnungsparameters betrachten. Integriert man über alle Freiheitsgrade außer denen des Polyakov-Loops, so erhält man eine effektive skalare Feldtheorie, welche die globale $Z(3)$-Symmetrie des Ordnungsparameters teilt. Die neuen Polyakov-Loop-Variablen lassen sich durch Elemente der $Z(3)$ repräsentieren. Auf diese Weise erhält man eine klassische $3d$-$Z(3)$-Spintheorie mit einer Kopplung, die als inverse Temperatur fungiert. Die Kopplung g der $SU(3)$-Eichtheorie wird explizit temperaturabhängig, wenn die hochfrequenten Anteile der Felder in τ-Richtung ausintegriert werden und die Zeitabhängigkeit fallengelassen wird. Dem

Deconfinement-Phasenübergang entspricht der Übergang von einer geordneten zu einer ungeordneten Phase der Spintheorie, wobei die geordnete Phase bei hohen physikalischen Temperaturen erreicht wird. Ferner kann man Argumente dafür finden, daß die sehr komplexen Wechselwirkungen zwischen den Spins von endlicher Reichweite bleiben. Mit Hilfe von RG-Argumenten kann man nun Aussagen über den Deconfinement-Phasenübergang treffen [12, 13]. Aus der Untersuchung des $3d$-$Z(3)$-Spinmodells sowie aus Computersimulstionen der $SU(3)$ Eichtheorie weiß man, daß es sich beim Deconfinement-Phasenübergang um einen Phasenübergang erster Ordnung handelt.

2.2.2 Confinement in voller QCD

Durch die Einführung dynamischer Quarks wird die $Z(3)$ Symmetrie explizit gebrochen. Der grassmannwertige Charakter der Quarkfelder erzwingt antiperiodische Randbedingungen in der Zeit

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = -\psi(\mathbf{x}, \beta). \tag{2.20}$$

Durch verallgemeinerte Eichtransformationen (2.13) werden die antiperiodischen Randbedingungen verletzt. Die Stärke der Symmetriebrechung ist durch die Quarkmasse m bestimmt. Weiterhin ist der Polyakov-Loop $L(\mathbf{x})$ kein geeigneter Ordnungsparameter mehr, da sein Erwartungswert nun für alle Temperaturen von Null verschieden ist ($\langle L(\mathbf{x})\rangle \neq 0 \ \forall \ T$). Dies ist physikalisch leicht einzusehen: Ist die Energie innerhalb der Flußröhre zwischen den Quarks hinreichend groß, so wird ein weiteres Quark-Antiquark-Paar aus dem Vakuum erzeugt, wie in Abbildung 2.1 verdeutlicht.

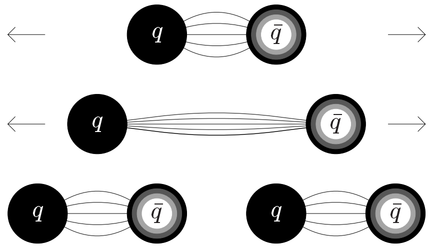


Abbildung 2.1: *Schematische Darstellung der Paar-Erzeugung.*

Aus der Analyse des Z(3)-Spinmodells weiß man, daß auch die Magnetisierung als Ordnungsparameter versagt, wenn ein kleines äußeres Feld eingeschaltet wird. Die Diskontinuitäten in den Observablen verringern sich, bis die Phasenübergangslinie erster Ordnung in einem Endpunkt zweiter Ordnung endet. Dies geschieht auch hier. In Analogie zum Z(3)-Spinmodell kann die inverse Masse als äußeres Feld aufgefaßt werden. Dabei entspricht $h \to 0$ auch $m \to \infty$.

2.3 Der chirale Phasenübergang

2.3.1 Der chirale Limes

Wie bereits in Kapitel 2.1 erwähnt, besitzt die Lagrangedichte (2.1) im chiralen Limes ($m \to 0$) die Symmetrie $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$. Dies wird deutlich, wenn man Projektionsoperatoren $P_\pm$ einführt, die auf die links- und rechtshändigen Anteile der Spinoren projezieren. In der chiralen Darstellung der γ-Matrizen gilt

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \\ & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad P_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \gamma_5). \tag{2.21}$$

Dies impliziert die Vertauschungsrelation $P_\pm\gamma_\mu = \gamma_\mu P_\mp$. Formuliert man den fermionischen Anteil der Wirkung ($m = 0$) mit Hilfe der Projektionsoperatoren $P_\pm$ in rechtshändige Spinoren $\psi_R(x) = P_+\psi(x)$ und linkshändige Spinoren $\psi_L(x) = P_-\psi(x)$ getrennt, so stellt man fest, daß $\psi_R(x)$ und $\psi_L(x)$ nicht koppeln. Man erhält

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_F &= \bar\psi\ [i\gamma^\mu D_\mu(A)]\ \psi \\
&= (\bar\psi P_+ + \bar\psi P_-)\ [i\gamma^\mu D_\mu(A)]\ (P_+\psi + P_-\psi) \\
&= \bar\psi P_+\ [i\gamma^\mu D_\mu(A)]\ P_-\psi \ + \ \bar\psi P_-\ [i\gamma^\mu D_\mu(A)]\ P_+\psi \\
&= \bar\psi_L\ [i\gamma^\mu D_\mu(A)]\ \psi_L \ + \ \bar\psi_R\ [i\gamma^\mu D_\mu(A)]\ \psi_R \\
&= \mathcal{L}_F^L \ + \ \mathcal{L}_F^R.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Die Tatsache, daß rechte und linke Spinoren nicht gekoppelt sind, drückt die Freiheit aus, diese Spinoren getrennt voneinander zu transformieren. Die Lagrangedichte bleibt also invariant unter

$$\begin{aligned}
\psi &\longrightarrow \psi' = G\psi = (UP_+ + VP_-)\psi \qquad\qquad U,V \in SU(N_f) \\
\bar\psi &\longrightarrow \bar\psi' = \bar\psi G^\dagger = \bar\psi(P_-U^\dagger + P_+V^\dagger).
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Diese chirale Symmetrie ist im Grundzustand spontan auf die $SU(N_f)_V$ heruntergebrochen, sprich der Freiheit der unitären Transformationen im Raum der Spinoren (nicht mehr auf linke und rechte Spinoren getrennt). Ein nicht-verschwindendes *chirales Kondensat* $\bar\psi\psi$ bringt dies zum Ausdruck. Im chiralen Kondensat koppeln links- und rechtshändige Spinoren, ein solcher Term ist daher nicht invariant unter chiralen Transformationen der Form:

$$\begin{aligned}
\bar\psi\psi &= (\bar\psi P_+ + \bar\psi P_-)(P_+\psi + P_-\psi) \\
&= \bar\psi_L\psi_R + \bar\psi_R\psi_L \\
&\longrightarrow \bar\psi_L U^\dagger V\psi_R + \bar\psi_R V^\dagger U\psi_L.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Diese spontane Symmetriebrechung führt zu einem weiteren Phasenübergang in der QCD. Bei der Messung des Erwartungswertes $\langle\bar\psi\psi\rangle$ läßt sich wieder das Auftreten einer Übergangstemperatur T_u ermitteln

$$\langle\bar\psi\psi\rangle = \begin{cases} \text{endlich}, & T < T_u \\ 0, & T > T_u. \end{cases} \tag{2.25}$$

Damit ist das chirale Kondensat ein Ordnungsparameter für diesen Phasenübergang von einer chiral gebrochenen in eine chiral symmetrische Phase. Eine experimentelle Bestätigung der spontanen Symmetrie-Brechung gewinnt man aus dem Spektrum der QCD. Das *Goldstone Theorem* sagt im Falle einer spontanen Brechung der chiralen Symmetrie die Existenz von $N_f^2 - 1$ masselosen Bosonen voraus. Die drei Pionen π^-, π^0, π^+ sind leichter als alle anderen Teilchen des Spektrums und haben einen Gesamtdrehimpuls von Null.

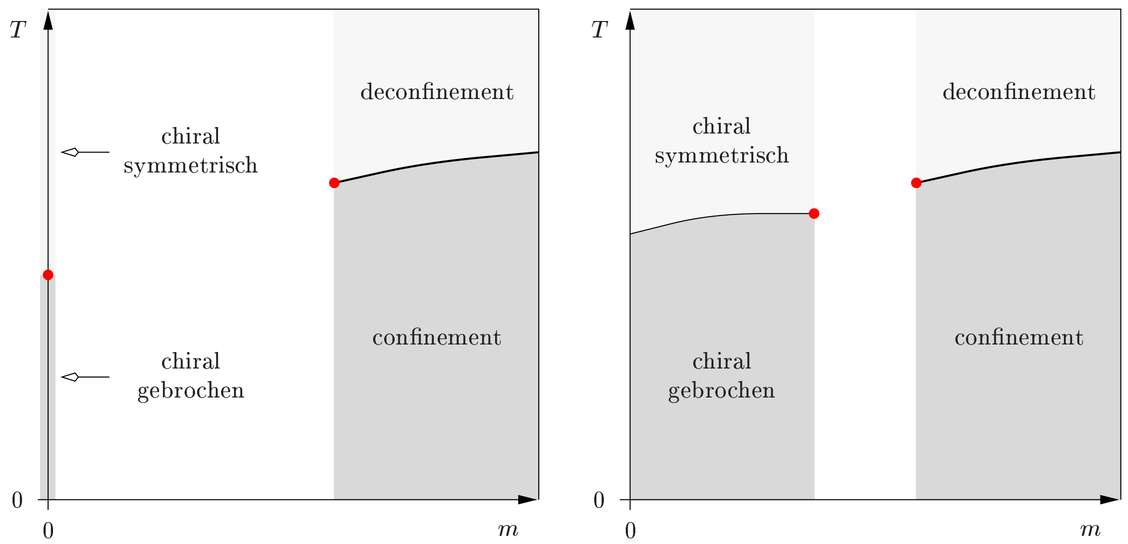
Sie können als Goldstonebosonen der spontanen Brechung der axialen Isospin Symmetrie $SU(2)$ identifiziert werden.

Effektive Wirkung

Wie beim Deconfinement-Phasenübergang läßt sich auch beim chiralen Phasenübergang eine effektive Wirkung finden, welche die chirale Symmetrie die QCD teilt und mit deren Hilfe der Übergang einfacher zu untersuchen ist. Diese Wirkungen sind meistens in Termen von $(N_f \times N_f)$-Matrizen gefaßt (chirale Matrix Modelle). Das lineare σ-Modell [14] sagt einen Phasenübergang zweiter Ordnung für $N_f = 2$ und einen erster Ordnung für $N_f = 3$ voraus.

2.3.2 Einführung einer Quarkmasse $m \neq 0$

Der Massenterm in der Lagrangedichte (2.1) ist proportional zum chiralen Kondensat und verursacht daher eine explizite Brechung der chiralen Symmetrie. Das hat das Versagen des chiralen Kondensates als Ordnungsparameter zur Folge. Im Fall $N_f = 3$ bleibt der Phasenübergang erster Ordnung noch erhalten, bis die Phasenübergangslinie bei einer kritischen Masse m_c in einem Phasenübergang zweiter Ordnung endet. Im Fall $N_f = 2$ wird bei einer von Null verschiedenen Masse kein Phasenübergang erwartet.



(a) $N_f = 2$ (b) $N_f = 3$

Abbildung 2.2: *Phasendiagramm der QCD für zwei und drei Quark-Flavour.*

2.4 Phasendiagramm der QCD

Mit dem Wissen aus den Abschnitten 2.2 und 2.3 läßt sich ein Phasendiagramm der QCD erstellen. In Abbildung 2.2 sind die vier Phasen "deconfinement","confinement", "chiral gebrochen" und "chiral symmetrisch" in einem T-m-Diagramm eingetragen. Man sieht, daß für die Fälle $N_f = 2$ und $N_f = 3$ jeweils zwei verschiedene kritische Punkte auftreten.

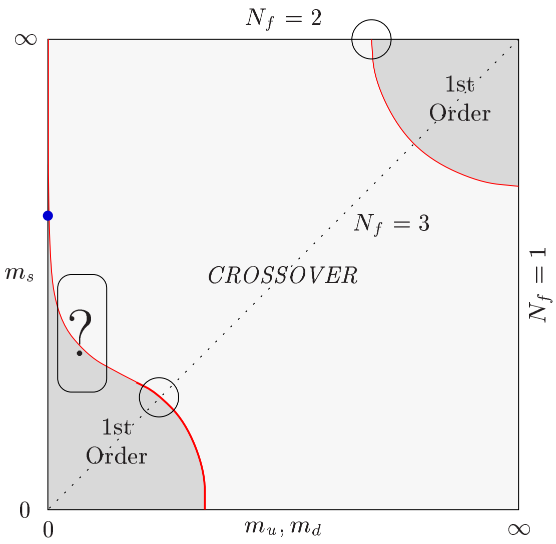


Abbildung 2.3: *Phasendiagramm der QCD für $2 + 1$ Quark-Flavour.*

Die Sichtweise kann verallgemeinert werden, und die zwei Fälle zusammen gefaßt werden, indem man eine Quarkmasse m_s getrennt von zwei weiteren Quarkmassen $m_u = m_d$ variiert. Trägt man in einem solchen m_s-(m_u,m_d)-Diagramm die Ordnung der temperaturgetriebenen Phasenübergänge ein, ergibt sich Abbildung 2.3. Auf der Diagonalen hat man drei massenentartete Quarkflavour. Auf der oberen Begrenzung ($m_s = \infty$) ist der Fall $N_f = 2$ aufgetragen. Der Punkt $m_u = m_d = m_s = \infty$ entspricht der reinen Eichtheorie. Unten links und oben rechts liegen Gebiete eines Phasenüberganges erster Ordnung, die jeweils von einer Phasenübergangslinie zweiter Ordnung begrenzt werden. Dort wo auf der m_s-Achse der Wechsel von erster zu zweiter Ordnung geschieht, wird ein trikritischer Punkt erwartet. Der mit "Crossover" gekennzeichnete Bereich ist ein Bereich ohne Phasenübergang. Der physikalische Punkt ist im Bereich des Fragezeichens zu suchen. Die beiden eingekreisten Punkte auf der ($N_f = 2$)- und ($N_f = 3$)-Linie sind die kritischen Punkte, die in dieser Arbeit untersucht werden sollen. Für sie erwartet man die Universalitätsklasse des $3d$-Ising-Modells [15].

Kapitel 3

QCD auf dem Gitter

Die QCD muß wie jede Quantenfeldtheorie regularisiert und renormiert werden, da bei der Auswertung der Theorie viele Divergenzen auftreten. Eine mit Computersimulation sehr gängige Art und Weise, diese Divergenzen zu entfernen, ist die Gitterregularisierung. Nachdem eine Gitterwirkung mit diskritisierten Eich- und Quarkfeldern gewählt ist, müssen die nackten Parameter der Theorie so renormiert werden, daß die richtige Kontinuumsphysik reproduziert wird.

3.1 Gittereichtheorie

Wie der Name Gittereregularisierung schon vermuten läßt, reduziert man die überabzählbar vielen Freiheitsgrade der Materie- und Eichfelder auf abzählbar viele, indem man ein vierdimensionales kartesisches Raum-Zeit-Gitter

$$\mathbb{G} = \left\{ (x_1, x_2, x_3, x_4) \;\middle|\; x_i = an_i,\ n_i \in \mathbb{Z} \right\} \tag{3.1}$$

mit Gitterabstand a einführt. Weiter definiert man $\hat{\mu}$ als Einheitsvektor in μ-Richtung. Alle Materiefelder $\psi(x)$ sind nun nur noch an Gitterpunkten definiert. Ferner müssen Ableitung und Integration auf dem Gitter definiert werden. Daher macht man die folgenden Ersetzungen

$$\begin{aligned} x_\mu &\longrightarrow an_\mu \\ \psi(x) &\longrightarrow \psi(an) = \psi_{an} \\ \partial_\mu \psi(x) &\longrightarrow \frac{1}{a}\Big(\psi_{a(n+\hat{\mu})} - \psi_{an}\Big) \\ \int d^4x\ \psi(x) &\longrightarrow a^4 \sum_n \psi_{an}. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Der Gitterabstand a wird ab jetzt der Einfachheit halber $a = 1$ gesetzt.

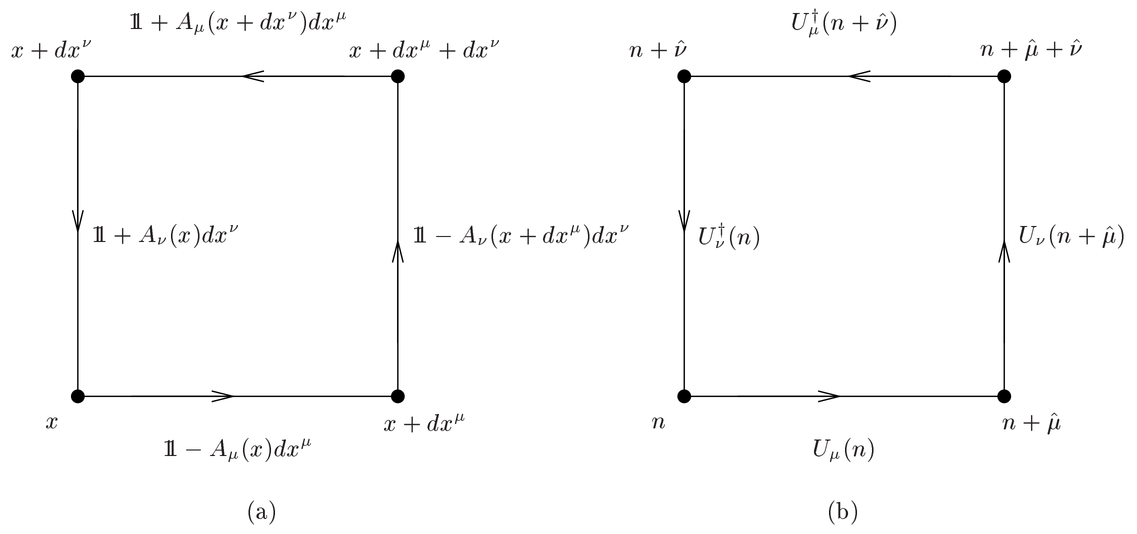


Abbildung 3.1: (a) *Infinitesimales Rechteck im Kontinuum*, (b) *Elementare Plaquette auf dem Gitter.*

Die lokale Eichinvarianz der Wirkung und damit die kovariante Ableitung waren aus dem Prinzip des Paralleltransports $\mathcal{U}(\mathcal{C})$ der Materiefelder entlang einer Kurve $\mathcal{C}$ entstanden. Die einzige Möglichkeit eines Paralleltransports im diskretisierten Raum $\mathbb{G}$ besteht im Transport von einen Gitterpunkt zum nächsten. So ist es naheliegend, die Links zwischen den Gitterpunkten mit Paralleltransportern zu identifizieren. Man definiert daher Linkvariablen $U_\mu(n)$ mit Hilfe der *Schwinger'schen* Linienintegrale über die Eichfelder

$$U_\mu(n) = \mathrm{P}\exp\left\{-\int_n^{n+\hat\mu} dx\ A_\mu(x)\right\}. \tag{3.3}$$

Dies impliziert den Paralleltransport in der $(-\mu)$-Richtung von $n+\hat\mu$ nach n. Für ihn gilt

$$U_{-\mu}(n+\hat\mu) = U_\mu^\dagger(n). \tag{3.4}$$

Die Linkvariablen sind daher gerichtete Größen. Weiterhin sind sie Elemente der Eichgruppe $SU(3)$ und transformieren unter lokalen Eichtransformationen $\Lambda(n)$ wie

$$\begin{aligned} U_\mu(n) &\longrightarrow U'_\mu(n) = \Lambda(n)U_\mu(n)\Lambda^\dagger(n+\hat\mu) \\ U_\mu^\dagger(n) &\longrightarrow U_\mu^{\dagger\prime}(n) = \Lambda(n+\hat\mu)U_\mu(n)\Lambda^\dagger(n). \end{aligned} \tag{3.5}$$

Die Eichfelder $A_\mu(x)$ bleiben also kontinuierlich. Die Diskretisierung des Raumes erzwingt nur die Diskretisierung der Paralleltransporter, die als grundlegende Größen der Gittereichtheorie dienen.

Der Feldstärketensor $F_{\mu\nu}(x)$ entsteht aus dem Paralleltransport entlang eines geschlossenen infinitesimalen Rechtecks $\mathcal{C}_{xx}$ in der (μ,ν)-Ebene. In der Abbildung 3.1 sind die infinitesimalen Paralleltransporter dargestellt, für ihr pfadgeordnetes Produkt gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(\mathcal{C}_{xx}) &= \Big[\mathbb{1} - A_\mu(x)dx^\mu\Big]\Big[\mathbb{1} - A_\nu(x+dx^\mu)dx^\nu\Big] \\ &\qquad\qquad \cdot\Big[\mathbb{1} + A_\mu(x+dx^\nu)dx^\mu\Big]\Big[\mathbb{1} + A_\nu(x)dx^\nu\Big] \\ &= \mathbb{1} - F_{\mu\nu}(x)dx^\mu dx^\nu. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Wieder liegt es daher nahe, die entsprechende Größe auf dem Gitter zu definieren. Das pfadgeordnete Produkt der Linkvariablen entlang eines elementaren Rechtecks auf dem Gitter wird als Plaquettevariable

$$U_{\mu,\nu}(n) = U_\mu(n)\ U_\nu(n+\hat{\mu})\ U_\mu^\dagger(n+\hat{\nu})\ U_\nu^\dagger(n) \tag{3.7}$$

bezeichnet. Aus den Plaquettevariablen kann für die Eichwirkung $S_G[A]$ im Kontinuum eine Gittereichwirkung $S_G[U]$ konstruiert werden. Die einfachste Gittereichwirkung ist die Wilson-Wirkung [16]

$$\begin{aligned} S_G[U] &= \sum_n \sum_{1\le\mu\le\nu\le4} -\beta\left\{\frac{1}{2\mathrm{Tr}\,\mathbb{1}}\Big(\mathrm{Tr}\,U_{\mu,\nu}(n) + \mathrm{Tr}\,U^\dagger_{\mu,\nu}(n)\Big) - 1\right\} \\ &= \sum_n \sum_{1\le\mu\le\nu\le4} \beta\left\{1 - \frac{1}{3}\mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\,U_{\mu,\nu}(n)\right\} \end{aligned} \tag{3.8}$$

mit $\beta = 6/g^2$. Da man unter der Spur zyklisch vertauschen kann, ist $\mathrm{Tr}\,U_{\mu,\nu}(n)$ und damit auch die Wirkung $S_G[U]$ eichinvariant. Bei einer Taylorentwicklung der Linkvariablen und Benutzung der Backer-Hausdorff-Formel wird deutlich, daß $S_G[U]$ im Limes $a \to 0$ die korrekte Eichwirkung $S_G[A]$ reproduziert. In niedrigster Ordnung g treten dabei Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ auf.

3.2 Diskretisierung der Fermionfelder

3.2.1 Das Fermionen-Verdopplungs-Problem

Die Konstruktion einer Wirkung für den fermionischen Teil ist nicht so einfach. Die Probleme treten schon auf dem Niveau des freien Dirac-Feldes auf. Der erste Versuch einer Fermionwirkung auf dem Gitter ist

$$S_F^{\mathrm{naiv}}[\psi] = \sum_{n,m,\alpha,\beta} \bar{\psi}^\alpha(n) K^{\alpha\beta}(n,m)\psi^\beta(m), \tag{3.9}$$

mit der Fermionmatrix

$$K^{\alpha\beta}(n,m) = \sum_\mu \frac{1}{2}(\gamma_\mu)^{\alpha\beta}[\delta_{m,n+\hat{\mu}} - \delta_{m,n-\hat{\mu}}] + M\delta_{m,n}\delta_{\alpha,\beta}. \tag{3.10}$$

Dabei ist M die Masse des Fermions und α,β bezeichnen einen Multi-Index für Flavour- und Farb-Freiheitsgrade. Berechnet man den Fermionpropagator, der gerade durch die inverse Fermionmatrix gegeben ist, erhält man

$$\langle \psi_\alpha(n)\bar{\psi}_\beta(m)\rangle = K^{-1}_{\alpha\beta}(n,m) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{[-i\sum_\mu \gamma_\mu \tilde{p}_\mu + M]_{\alpha\beta}}{\sum_\mu \tilde{p}_\mu^2 + M^2} e^{ip(n-m)} \tag{3.11}$$

mit

$$\tilde{p}_\mu = sin(p_\mu). \tag{3.12}$$

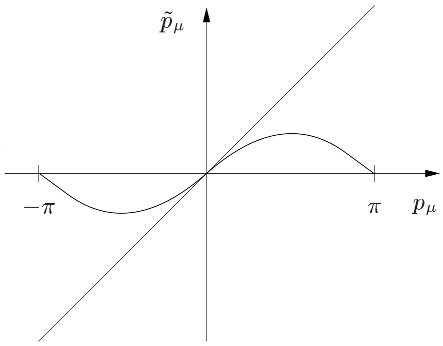


Abbildung 3.2: $\tilde{p}_\mu = sin(p_\mu)$ *in der Brillouin-Zone*

Bedingt durch den endlichen Gitterabstand $a = 1$ erhält man im Impulsraum eine Brillouin-Zone von $[-\pi, \pi]$. Für $\tilde{p}_\mu \to p_\mu$ bzw. für kleine Impulse p_μ ergibt sich der gewohnte Fermionpropagator. Mit der Funktion $\tilde{p}_\mu$ besitzt der Propagator jedoch $2^d = 16$ Pole anstatt einem. Diese Pole entstehen durch Impulsanregungen in den Ecken der Brillouin-Zone und verhindern so die korrekte Reproduzierung des Kontinuumslimes. Die Abbildung 3.2 soll dies verdeutlichen: Die Gerade in Abbildung 3.2 entspricht dem Kontinuum $\tilde{p}_\mu = p_\mu$. Die 16 Pole des Propagators kommen der Beschreibung eines 16 Teilchen-Zustandes gleich. Das ursprüngliche Fermion ist also pro Raumdimension verdoppelt worden, und die 15 zusätzlichen Teilchen sind reine Gitterartefakte und völlig unphysikalisch.

3.2.2 Kogut-Susskind Fermionen

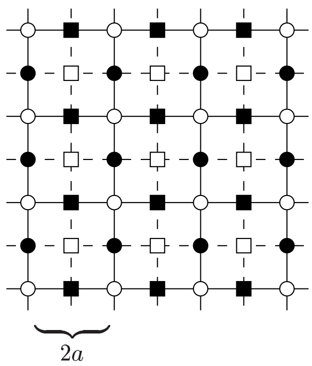


Abbildung 3.3: *Verteilung der Flavour und Dirac-Freiheitsgrade auf ein 2d-Gitter. Jedes Symbol stellt einen Freiheitsgrad dar.*

Zur Lösung des Fermionen-Verdopplungs-Problems gibt es verschiedene Ansätze. In den Simulationen im Rahmen dieser Arbeit wurde die Kogut-Susskind oder “staggered” Formulierung der Fermionen auf dem Gitter verwendet. Sie soll daher hier kurz dargelegt werden. Nach einer Idee von Kogut und Susskind [17, 18] wird die Brillouin-Zone verkleinert, indem der effektive Gitterabstand bezüglich der Fermionfelder verdoppelt wird. Dies geschieht durch die Verteilung der Flavour- und Dirac-Freiheitsgrade auf dem Gitter, wie in Abbildung 3.3 dargestellt. Da ein Hyperkubus 2^d Ecken hat, können $2^{d/2}$ Flavour- und genauso viele Dirac-Freiheitsgrade verteilt werden. Auf einem vierdimensionalen

Raum-Zeit-Gitter bringt man so vier Spinoren mit je vier Dirac-Komponenten unter. Das neue Fermionfeld $\chi^c(n)$ hat nur noch drei Farbkomponenten. Die Schwierigkeit besteht darin, eine Wirkung $S_F[\chi]$ zu definieren, die im Kontinuumslimes $a \to 0$ die richtige Fermionwirkung reproduziert. Außerdem soll eine Vorschrift zur Rekombination der alten Quarkfelder aufgestellt werden. Zur Motivation der staggered Fermionwirkung betrachtet man ein freies Dirac-Feld $\psi(n)$ auf dem Gitter und führt eine lineare ortsabhängige Transformation der Dirac-Komponenten der Form

$$\begin{aligned} \psi(n) &= T(n)\chi(n) \\ \bar{\psi}(n) &= \bar{\chi}(n)T^\dagger(n) \end{aligned} \tag{3.13}$$

durch. Die Transformation wird dabei so gewählt, daß folgende Gleichheit erfüllt ist

$$T^\dagger(n)\gamma_\mu T(n+\hat{\mu}) = \eta_\mu(n)\mathbb{1}. \tag{3.14}$$

Die $\eta_\mu(n)$ werden als staggered Phasen bezeichnet. Eine Transformation, welche diese Bestimmungsgleichung erfüllt, ist gegeben durch

$$T(n) = \gamma_1^{n_1}\gamma_2^{n_2}\gamma_3^{n_3}\gamma_4^{n_4} \tag{3.15}$$

mit den staggered Phasen

$$\eta_\mu(n) = (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{\mu-1}}, \quad \eta_1(n) = 1. \tag{3.16}$$

Durch die Transformation (3.13) kann die naive Fermionwirkung (3.9) spindiagonalisiert werden. Man erhält die Wirkung

$$S_F[\chi,\bar{\chi}] = \sum_{n,m,\mu,\alpha} \frac{1}{2}\eta_\mu(n)\bar{\chi}_\alpha(n)\Big([\delta_{m,n+\hat{\mu}} - \delta_{m,n-\hat{\mu}}] + M\delta_{m,n}\Big)\chi_\alpha(m). \tag{3.17}$$

Die Dirac-Komponenten sind nun völlig entkoppelt. Nun besteht auch keine Notwendigkeit mehr, ein Fermion durch einen vierkomponentigen Spinor zu beschreiben, man läßt die Summe über α fallen. Das Feld $\chi(n)$ ist nun, wie oben gefordert, nur noch einkomponentig im Flavour- und Dirac-Raum. Es beschreibt jedoch aufgrund der ortsabhängigen Transformation (3.13) jetzt vier verschiedene fermionische Freiheitsgrade. Die staggered Fermionwirkung ist daher

$$S_F^{\text{stag}}[\chi] = \sum_{n,m,\mu} \frac{1}{2}\eta_\mu(n)\bar{\chi}(n)\Big([\delta_{m,n+\hat{\mu}} - \delta_{m,n-\hat{\mu}}] + M\delta_{m,n}\Big)\chi(m). \tag{3.18}$$

Im Limes $a \to 0$ ergibt sich aus ihr die richtige Kontinuumswirkung eines Fermionfeldes mit vier Flavour-Freiheitsgraden und Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a)$. Zur Rekonstruktion der vier Quarkfelder aus dem staggered Feld $\chi(n)$ führt man ein neues Koordinatensystem N_μ ein, das auf die Gitterpunkte mit dem Gitterabstand $2a$ beschränkt ist (a wird wieder zu eins gesetzt). Es gilt

$$n_\mu = N_\mu + \rho_\mu, \tag{3.19}$$

wobei $\rho_\mu \in \{0,1\}$. Die Quarkfelder sind nun gegeben durch

$$\psi^{\alpha f}(N) = \mathcal{N}_0 \sum_\rho (T_\rho)^{\alpha f}\chi(N+\rho) \tag{3.20}$$

mit einer beliebigen Normierung $\mathcal{N}_0$ und den 16 Transformations-Matrizen

$$T_\rho = \gamma_1^{\rho_1}\gamma_2^{\rho_2}\gamma_3^{\rho_3}\gamma_4^{\rho_4}. \tag{3.21}$$

Auf diese Weise kann auch die ganze Wirkung wieder in Quarkfeldern ausgedrückt werden.

Das bisher freie Fermionfeld muß in eichinvarianter Weise an das Gluonfeld gekoppelt werden. Dies geschieht über die kovariante Ableitung, die im Kontinuum gegeben ist, durch das Produkt eines infinitesimalen Paralleltransporters mit der gewöhnlichen Ableitung

$$D_\mu = \Big(\mathbb{1} - A_\mu(x)dx^\mu\Big)\partial_\mu. \tag{3.22}$$

Auf dem Gitter ist die kovariante Ableitung daher das Produkt der Linkvariablen mit der Gitterableitung. Für wechselwirkende staggered Fermionen ergibt sich daher die Wirkung

$$S_F^{\text{stag}}\,[\chi,\bar{\chi},U] = \sum_{n,m} \bar{\chi}(n)K^{\text{stag}}\,[U](n,m)\chi(m) \tag{3.23}$$

mit der Fermionmatrix

$$K^{\text{stag}}\,[U] = \sum_\mu \frac{1}{2}\eta_\mu(n)\Big([U(n)\delta_{m,n+\hat{\mu}} - U^\dagger(n-\hat{\mu})\delta_{m,n-\hat{\mu}}] + M\delta_{m,n}\Big). \tag{3.24}$$

Mit Hilfe des Transfomationsverhaltens der Linkvariablen (3.5) und dem Transformationsverhalten der Fermionfelder

$$\begin{array}{lcl} \psi_n & \longrightarrow & \psi'_n = \Lambda(n)\psi_n \\ \bar{\psi}_n & \longrightarrow & \bar{\psi}'_n = \bar{\psi}_n\Lambda^\dagger(n), \end{array} \tag{3.25}$$

sieht man leicht, daß die Wirkung unter lokalen Eichtransformationen $\Lambda(n)$ invariant ist.

3.3 Observablen auf dem Gitter

3.3.1 Das Pfadintegral auf dem Gitter

Jegliche Information der QCD ist durch die QCD-Greens-Funktionen $G^{\Phi_1,\Phi_2,\cdots}(x_1,x_2,\cdots)$ mit $\Phi_i \in \{\psi,\bar{\psi},A\}$ gegeben. Im euklidischen Pfadintegralformalismus sind sie definiert als

$$G^{\Phi_1,\Phi_2,\cdots}(x_1,x_2,\cdots) = \langle\Phi_1(x_1),\Phi_2,(x_2)\cdots\rangle = \frac{1}{Z}\int D\Phi\ (\Phi_1(x_1),\Phi_2,(x_2)\cdots)\ e^{-S_E[\Phi]}, \tag{3.26}$$

mit

$$Z = \int D\Phi\ e^{-S_E[\Phi]}, \qquad D\Phi = D\psi\ D\bar{\psi}\ DA. \tag{3.27}$$

Der Normierungsfaktor $Z = Z(V,T,\beta,m)$ wird in Analogie zur statistischen Physik als Zustandssumme der QCD bezeichnet und ist abhängig vom Volumen V, der Temperatur T, den Parametern β und m. Auf einem Gitter mit N_τ Gitterpunkten in zeitlicher

Richtung und N_σ Gitterpunkten in jede der räumlichen Richtungen gilt für Volumen und Temperatur

$$\frac{1}{T} = N_\tau a, \qquad V^{1/3} = N_\sigma a. \tag{3.28}$$

$D\phi$ steht für die Summe über alle möglichen Konfigurationen $(\psi(x), \bar{\psi}(x), A(x))$. Im Kontinuum ist dieses Integrationsmaß ∞-dimensional und hat keine präzise mathematische Bedeutung. Nach dem Übergang zum Gitter und zu der Kogut-Susskind-Formulierung der Fermionen bekommt es die wohldefinierte Bedeutung

$$D\Phi \longrightarrow \prod_n d\chi_n \; d\bar{\chi}_n \; dU(n). \tag{3.29}$$

Dadurch wird das Pfadintegral handhabbar und ermöglicht die Auswertung der QCD mit dem Computer. Mit den Konventionen aus Abschnitt 3.1 und Abschnitt 3.2.2 erhält man für die euklidische Wirkung auf dem Gitter

$$S_E[\chi, \bar{\chi}, U] = S_G[U] + S_F[\chi, \bar{\chi}, U]. \tag{3.30}$$

Ist die Wirkung in staggered Feldern ausgedrückt, erhält man auch staggered-Greens-Funktionen, die jedoch mit Hilfe von (3.20) in die gewöhnlichen QCD-Greens-Funktionen transformiert werden können. Am Beispiel der Zwei-Punkt-Funktion ergibt sich

$$\left\langle \psi^{\alpha f}(N) \; \bar{\psi}^{\alpha' f'}(N') \right\rangle = \frac{1}{8} \sum_{\rho, \rho'} (T_\rho)^{\alpha f} \left\langle \chi(N+\rho) \; \bar{\chi}(N'+\rho') \right\rangle (T_{\rho'})^{\alpha' f'}. \tag{3.31}$$

3.3.2 Polyakov-Loop und chirales Kondensat

Die gluonischen Observablen, die im Rahmen dieser Arbeit gemessen wurden, sind der Polyakov-Loop und die Plaquettevariable. Die Plaquettevariable (3.7) ist bereits in Abschnitt 3.1 als Gitterobservable eingeführt und durch Linkvariablen ausgedrückt worden. Auch der Polyakov-Loop (2.15) muß auf dem Gitter durch Linkvariablen ausgedrückt werden. Er beschriebt einen Paralleltransport in zeitlicher Richtung entlang eines periodisch geschlossenen Loops. Für ihn gilt daher auf einem Gitter mit der Ausdehnung N_τ in zeitlicher Richtung und N_σ in räumlicher Richtung

$$\mathrm{L} = \frac{1}{N_\sigma^3} \sum_{\mathbf{n}} L(\mathbf{n}), \qquad L(\mathbf{n}) = \frac{1}{3} \mathrm{Tr} \prod_{n_4} U_4(\mathbf{n}, x_4). \tag{3.32}$$

Der Faktor 1/3 ist ein Normierungsfaktor, der den komplexen Polyakov-Loop Werte zwischen Null und eins annehmen läßt. Die Suszeptibilität des Polyakov-Loops ist gegeben durch

$$\chi_L \equiv N_\sigma^3 \left[\left\langle |\mathrm{L}|^2 \right\rangle - \left\langle |\mathrm{L}| \right\rangle^2 \right]. \tag{3.33}$$

Ihr Maximum wurde verwendet, um die pseudokritische Kopplung $\beta_{c,L}$ zu bestimmen. Bei der Messung des chiralen Kondensates bedient man sich der Möglichkeit, die fermionischen Freiheitsgrade aus der Zustandssumme Z auszuintegrieren. Auf diese Weise gelingt es auch, die Anzahl der Flavour-Freiheitsgrade zu variieren, die in der Kogut-Susskind-Formulierung bisher auf $N_f = 4$ fixiert war. Nach der Ausintegration der grassmannwertigen Fermionfelder erhält man die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z &= \int DU \; (\det K[U])^{N_F/4} \; \exp\{-S_G[U]\} \\ &= \int DU \; \exp\left\{-S_G[U] + \frac{N_F}{4} \mathrm{Tr} \, \ln K[U]\right\}. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Die Abhängigkeit der Fermionmatrix $K[U]$ von der Quarkmasse m ist derart, daß

$$K[U] = m\mathbb{1} + D[U]. \tag{3.35}$$

Für das chirale Kondensat, das sich als Ableitung des Logarithmus der Zustandssumme nach der Quarkmasse ergibt, gilt daher

$$\langle\bar{\psi}\psi\rangle = \frac{1}{N_\tau N_\sigma^3} \frac{N_F}{4} \frac{\partial}{\partial m} \ln Z = \frac{1}{N_\tau N_\sigma^3} \frac{N_F}{4} \left\langle \mathrm{Tr} \, K^{-1} \right\rangle. \tag{3.36}$$

Schließlich erhält man für die chirale Suszeptibilität als Ableitung des chiralen Kondensates nach der Quarkmasse

$$\begin{aligned} \chi_{\langle\bar{\psi}\psi\rangle} &= \frac{1}{N_\tau N_\sigma^3} \frac{N_F}{4} \frac{\partial^2}{\partial m^2} \ln Z \\ &= \frac{1}{N_\tau N_\sigma^3} \frac{N_F}{16} \left[\left\langle \left(\mathrm{Tr} \, K^{-1} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \left(\mathrm{Tr} \, K^{-1} \right) \right\rangle^2 \right] \\ &\quad - \frac{N_f}{4} \sum_n \left\langle K^{-1}(n,0) K^{-1}(0,n) \right\rangle. \end{aligned} \tag{3.37}$$

Der zweite Term in (3.37) wird als "connected part" der chiralen Suszeptibilität bezeichnet und wird in dieser Arbeit vernachlässigt, da dieser Anteil keinen großen Einfuß auf das divergente Verhalten der chiralen Suszeptibilität hat.

3.3.3 Der Kontinuumslimes

Betrachten wir zunächst reine Gittereichtheorie ohne dynamische Fermionen. Durch die Einführung eines endlichen Gitterabstandes a ergeben sich Diskretisierungsfehler. Ferner ist mit a ein Impuls-cut-off Λ in die Theorie eingebracht worden. Man möchte nun die Kopplung g als einzigen freien Parameter der Theorie so justieren ($g \to g^*$), daß die Observablen O unabhängig von a bzw. Λ werden. Auf diese Weise kann Kontinuumsphysik bei endlichem Gitterabstand a erzielt werden. Bestärkt in der Annahme der Existenz einer solchen Kopplung g^* wird man durch die Analogie zu statistischen Spin-Modellen, bzw. durch die dadurch erwachsende Verbindung zu der Theorie der kritischen Phänomene. Die inversen Massen $1/m_i$ einiger massiver Teilchen-Zustände auf dem Gitter können mit der Spin-Korrelationslänge ξ in Beziehung gesetzt werden durch

$$\xi \propto \frac{1}{m_i a}. \tag{3.38}$$

Dies impliziert eine divergente Korrelationslänge $\xi \to \infty$ im Limes $a \to 0$, die wiederum auf einen kritischen Punkt schließen läßt. Es sollte also eine kritische Kopplung g^* geben, so daß

$$g(a) \to g^* \quad \text{für} \quad a \to 0, \tag{3.39}$$

bzw.

$$O(g^*, a) = O(g^*, 0). \tag{3.40}$$

Als Nebenprodukt liefert die Universalitätshypothese die Äquivalenz verschiedener Diskretisierungsschemata sowie die Restaurierung sämtlicher Symmetrien der Kontinuumstheorie, die auf dem Gitter gebrochen sind. Aus der Forderung der Unabhängigkeit der Observablen vom Gitterabstand a erhält man die Renormierungsgruppengleichungen

$$\begin{aligned} a\frac{d}{da}O(g(a),a) &= 0 \\ \left(a\frac{\partial}{\partial a} + a\frac{\partial g}{\partial a}\frac{\partial}{\partial g}\right)O(g(a),a) &= 0 \\ \left(a\frac{\partial}{\partial a} - \beta(g)\frac{\partial}{\partial g}\right)O(g(a),a) &= 0. \end{aligned} \tag{3.41}$$

Für die Callan-Symanzik β-Funktion besteht neben der numerischen Bestimmung auch die Möglichkeit der störungstheoretischen Bestimmung unter der Annahme der asymptotischen Freiheit der Theorie ($g^* = 0$). Entwickelt man eine Observable (z.B. das Potential) um $g^* = 0$ so ergibt sich

$$\beta(g) = -b_0 g^3 - b_1 g^5 + \cdots \tag{3.42}$$

mit

$$\begin{aligned} b_0 &= \frac{1}{16\pi^2}\left[11\frac{N_c}{3} - \frac{2}{3}N_f\right] \\ b_1 &= \left(\frac{1}{16\pi^2}\right)^2\left[\frac{34}{3}N_c^2 - \left(\frac{10}{3}N_c + \frac{N_c^2-1}{N_c}\right)N_f\right]. \end{aligned} \tag{3.43}$$

Durch Integration der β-Funktion erhält man für den Gitterabstand a in Abhängigkeit der Kopplung g

$$a(g) = \frac{1}{\Lambda_L}(b_0 g^2)^{-b_1/2b_0^2} e^{-1/2b_0 g^2}. \tag{3.44}$$

Die Integrationskonstante Λ_L ist eine aus dem Experiment zu bestimmende Konstante der Theorie. Aus den Überlegungen (3.41)-(3.44) ergeben sich nun folgende Konsequenzen: Auf dem Gitter gemessene Observablen trägt man häufig gegen die Kopplung g oder gegen[1] $\beta = 6/g^2$ auf anstatt gegen die Temperatur $T = 1/N_\tau a$. Die Gitterobservable $O(g)$ mißt man in Einheiten des Gitterabstandes a. Daher wird dieser zur Festlegung einer physikalischen Skala benötigt. Man erhält a aus (3.44) oder einer weiteren Observablen, die sowohl auf dem Gitter wie im Kontinuum bekannt ist. Man möchte die Observablen in der Nähe der kritischen Temperatur T_c auswerten, gleichzeitig aber bei kleinen Kopplungen g, um in der Nähe des Kontinuumslimes zu sein. Mit (3.28) wird klar, daß man daher gezwungen ist zu großen N_τ zu gehen. In der Praxis ist N_τ aber durch die ansteigende Simulationszeit

[1] Die Kopplung β der Standard-Wilson-Wirkung hat nichts mit der Callan-Symanzik β-Funktion zu tun

auf $N_\tau \approx 4-12$ begrenzt. Der Effekt dynamischer Fermionen ist es, den effektiven Gitterabstand zu verringern. Daher muß N_τ noch weiter erhöht werden. Ist man in der Nähe des Kontinuumslimes, muß die Observable ein asymptotisches Skalenverhalten zeigen. Dieses ergibt sich aus (3.44). Ferner muß sie unabhängig von der Wahl der Inputparameter sein. Es zeigt sich jedoch, daß ein großer Teil der Abweichungen vom Skalenverhalten in einer renormierten temperaturabhängigen Kopplung absorbiert werden kann. Es bleibt anzumerken, daß in dieser Arbeit trotz der Anwesenheit dynamischer Fermionen $N_\tau = 4$ fixiert wurde, und man daher mit großen Diskretisierungsfehlern rechnen muß.

3.4 Die Hoppingparameter-Entwicklung

Nach der Integration über die grassmannwertigen Fermionfelder in (3.27) erhält man eine effektive Wirkung der Form

$$S_{\text{eff}} = S_G[U] - \frac{N_f}{4} \text{Tr} \ln K[U]. \tag{3.45}$$

Durch eine Umnormierung der Fermionfelder

$$\chi(n) \longrightarrow \chi'(n) = \frac{1}{\sqrt{m}} \chi(n), \qquad \bar{\chi}(n) \longrightarrow \bar{\chi}'(n) = \frac{1}{\sqrt{m}} \bar{\chi}(n) \tag{3.46}$$

kann die Fermionmatrix geschrieben werden als

$$K[U] = 1\!\!1 + \kappa M[U]. \tag{3.47}$$

In der staggered Formulierung gilt für den Hoppingparameter $\kappa = 1/2m$. Der Limes $\kappa \to 0$ entspricht also der reinen $SU(3)$-Eichtheorie. Mit Hilfe von (3.47) kann der Logarithmus in (3.45) in Potenzen von κ entwickelt werden

$$\text{Tr} \ln K[U] = -\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\kappa^l}{l} \text{Tr}\, M[U]^l. \tag{3.48}$$

Da die Spur in (3.45) auch eine Spur über die Raum-Zeit beinhaltet, und da die Fermionmatrix $K[U]$ nur nächste Nachbarn verbindet, können die Beiträge der Ordnung $\mathcal{O}(\kappa^l)$ als eine Summe über alle geschlossenen Pfade der Länge l auf dem Gitter aufgefaßt werden. Auf einem hyperkubischen Gitter bestehen geschlossene Pfade aus einer geraden Anzahl von Links. Dementsprechend tragen Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\kappa^{2l})$ zur effektiven Wirkung bei. Der erste nicht-verschwindende Term der Ordnung $\mathcal{O}(\kappa^2)$ liefert eine Konstante sofern $N_\tau > 2$, die zur Berechnung der Erwarungswerte nichts beiträgt. Pfade der Länge vier sind Plaquettevariablen und für $N_\tau = 4$ auch der Polyakov-Loop. Die Summe über die Plaquettevariablen kann in der Wilson-Wirkung absorbiert werden und bewirkt eine Verschiebung des Parameters β. Für $N_\tau = 4$ erhält man so eine effektive Wirkung der Form

$$S_{\text{eff}} = S'_G[U] + \sum_n h \Big(L(n) + L^\dagger(n) \Big) + \mathcal{O}(\kappa^6) \qquad \text{mit} \qquad h \propto \frac{N_f}{m^4}. \tag{3.49}$$

Kapitel 4

Computersimulation und Auswertung von Daten

Nachdem die QCD nun diskretisiert ist, müssen Algorithmen zur numerischen Berechnung der Zustandssumme und der Observablen gefunden werden. Die so für eine bestimmte Kopplung g gewonnenen Observablen $O(g)$ lassen sich mit der Multi-Histogramm-Methode noch weiter auswerten und zu fast beliebigen Kopplungen umgewichten.

4.1 Der Hybrid-R-Algorithmus

4.1.1 Monte-Carlo-Integration mit Importance Sampling

Zur Berechnung der Observablen muß das Integral (3.26) berechnet werden. Schon auf kleinen Gittern ist die Dimension des Integrals ($N_\tau N_\sigma^3$) so groß, daß die Monte-Carlo-Integration (MC) das einzige numerische Integrationsverfahren ist, das nach moderaten Computer-Zeiten zu Ergebnissen führt. Das Prinzip der MC-Integration ist es, das Integral als Erwartungswert des Integranden im Integrationsintervall aufzufassen und diesen durch eine zufällige Stichprobe zu approximieren (siehe z.B. [19]). Da der Integrand durch den als Boltzmannfaktor interpretierbaren Term $\exp\{-S_E\}$ eine Funktion mit einem stark ausgeprägten Peak ist, wird die Effizienz der MC-Integration durch das Importance Sampling wesentlich erhöht. Mit der Grassmann-Algebra $\mathcal{G}$ gilt für den Konfigurationsraum

$$\mathbb{K} = \left\{ (\chi_n, \bar{\chi}_n, U_\mu(n)) \,\middle|\, \chi_n, \bar{\chi}_n \in \mathcal{G}^3,\ U_\mu(n) \in SU(3),\ n \in \mathbb{G},\ \mu \in \{1, \ldots, 4\} \right\}. \tag{4.1}$$

Wählt man aus $\mathbb{K}$ eine Stichprobe $I = \{c_1, \ldots, c_k\}$ ($c_i \in \mathbb{K}$) des Umfanges k entsprechend der Wahrscheinlichkeits-Verteilung

$$P(c) = \frac{\exp\{-S_E(c)\}}{\int dc\ \exp\{-S_E(c)\}}, \tag{4.2}$$

so vereinfacht sich die Berechnung der Observablen O. Es gilt dann

$$\langle O \rangle = \frac{\int dc\ O(c) \exp\{-S_E(c)\}}{\int dc\ \exp\{-S_E(c)\}} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} O(c_i) + \mathcal{O}(1/\sqrt{k}). \tag{4.3}$$

Zur Wahl der Stichprobe entsprechend der Verteilung (4.2) bedient man sich eines Tricks. Man iniziiert einen Markov-Prozeß, d.h. daß man ausgehend von einer beliebigen Startkonfiguration die weiteren Elemente der Stichprobe an Hand von Übergangswahrscheinlichkeiten $P(c_i \to c_f)$ wählt. Unter recht allgemeinen Bedingungen kann man zeigen, daß die Verteilung der durch den Markov-Prozeß gewonnenen Stichprobe gegen die gewünschte Verteilung (4.2) strebt. Hinreichende Bedingungen an die Übergangswahrscheinlichkeiten $P(c_i \to c_f)$ sind

- Ergodizität: $\exists\ n < \infty$ mit

  $$\int dc_1 \int dc_2 \cdots \int dc_n\ P(c_i \to c_1) P(c_1 \to c_2) \cdots P(c_n \to c_f) > 0 \qquad \forall\ c_i, c_f \in \mathbb{K}, \tag{4.4}$$

  d.h. von jeder beliebigen Startkonfiguration c_i aus ist es möglich nach endlich vielen Schritten n jede beliebige Konfiguration c_f zu erreichen.

- Detailed Balance:

  $$P(c_i) P(c_i \to c_f) = P(c_f) P(c_f \to c_i) \qquad \forall\ c_i, c_f \in \mathbb{K}, \tag{4.5}$$

  d.h. die Wahrscheinlichkeit, die Konfiguration c_i vorzufinden und dann zur Konfiguration c_f zu gelangen, ist dieselbe wie im umgekehrten Fall.

Ein Nachteil von MC-Simulationen ist die Korrelation der Daten. Aufgrund des Verfahrens, neue Konfigurationen anhand von Übergangswahrscheinlichkeiten zu wählen, sind die auf den Konfigurationen gemessenen Observablen im statistischen Sinne nicht unabhängig. Für den Erwartungswert ergibt sich daraus kein Problem, der Markov-Prozeß garantiert im Limes $k \to \infty$ den richtigen Erwartungswert. Der Fehler $\mathcal{O}(1/\sqrt{k})$ gilt jedoch nur für k unabhängige Daten. Effektiv hat man nur $k/2\tau_{int}$ unabhängige Daten, wobei τ_{int} die integrierte Autokorrelationszeit ist. Der Fehler ist daher von der Ordnung $\mathcal{O}(\sqrt{2\tau_{int}/k})$. τ_{int} ist über den dynamischen kritischen Exponenten z mit der Korrelationslänge ξ verknüpft. Es gilt

$$\tau_{int} \propto \xi^z. \tag{4.6}$$

Der dynamische kritische Exponent z ist von dem verwendeten Algorithmus abhängig und variiert von $z \approx 0$ für nicht lokale Update-Verfahren wie dem Cluster-Algorithmus bis zu $z \approx 2$ für lokale Algorithmen wie Metropolis- oder Heatbath-Algorithmus. Da die Korrelationslänge am kritischen Punkt divergiert bzw. bis zur vollen Länge des Systems anwächst, benötigt man dort sehr viele Daten, d.h. sehr lange Simulationszeiten. Dieses Phänomen bezeichnet man als "*critical slowing down.*"

4.1.2 Die Pseudofermion-Methode

Wie schon in (3.34) gesehen, ist es möglich, das Integral über die Fermionfelder χ und $\bar{\chi}$ auszuführen. Auf diese Weise bekommt man die Determinante der Fermionmatrix in die Zustandssumme. Manchmal ist es hilfreich, die Determinante wieder durch ein Integral auszudrücken, diesmal jedoch über "pseudofermionische" (bosonische !) Felder. Für positiv definite Matrizen M gilt

$$\frac{1}{\det(M)} = \int \prod_i d\phi_i^* \ d\phi_i \ \exp\{-\phi_n^* M_{n,m} \phi_m\}, \tag{4.7}$$

wobei die ϕ_n komplexwertige bosonische Felder darstellen. Die Fermionmatrix K ist leider nicht positiv definit, daher behilft man sich mit der Matrix $K^\dagger K$. Zum Einen ist sie positiv definit, und zum Anderen enthält sie keine Matrixelemente, die gerade und ungerade Gitterplätze miteinander verbindet (n ist ein gerader bzw. ungerader Gitterplatz, wenn $\sum_{\mu=1}^4 n_\mu$ gerade bzw. ungerade ist). Mit $K^\dagger K$ läßt sich eine Zustandssumme Z' definieren gemäß

$$\begin{aligned} Z' &= \int DU \ \det(K[U])^2 \exp\{-S_G[U]\} \\ &= \int D\phi \ D\phi^* \ DU \ \exp\{-S_G[U] - \phi_n^* (K^\dagger[U]K[U])^{-1}_{n,m} \phi_m\}. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Da die Fermiondeterminante quadratisch in Z' eingeht, ist die Anzahl der Fermionen verdoppelt worden. Die Verdopplung läßt sich wieder rückgängig machen, indem die pseudofermionischen Felder ϕ_n nur auf geraden Gitterplätzen definiert werden ($\phi_n = 0 \ \forall \ n$ ungerade). Dann gilt $Z' = Z$. Eine Konfiguration c ist nun gegeben durch die Linkvariablen U und die Pseudofermionfelder ϕ_n^*, ϕ_n. Die ϕ_n^*, ϕ_n müssen in der Stichprobe I aus dem Konfigurationsraum $\mathbb{K}$ entsprechend der pseudofermionischen Wirkung S_{PF} verteilt sein. Eine solche Verteilung erreicht man, indem man $\exp\{-S_{PF}\}$ schreibt als

$$\exp\{-S_{PF}\} = \exp\{-\phi_n^*(K^\dagger[U]K[U])^{-1}_{n,m}\phi_m\} = \exp\{-\sum_i R_i^* R_i\}. \tag{4.9}$$

Die Pseudofermionfelder

$$\phi_n = K^\dagger[U]_{n,m} R_m \qquad \text{und} \qquad \phi_n^* = K[U]_{n,m} R_m^*, \tag{4.10}$$

die man aus den gaußverteilten Feldern R_i^* und R_i gewinnt, sind dann entsprechen (4.9) verteilt.

4.1.3 Die Molekulardynamik Methode

Entsprechend Abschnitt 4.1.1 muß ein Verfahren zum "update" einer Konfiguration gefunden werden. Aufgrund der nichtlokalen Wirkung, da die Fermionmatrix $K^\dagger K$ nicht nur nächste Nachbarn miteinander verbindet, bietet sich die Molekulardynamik-Methode

(MD) an. Dabei faßt man die Zustandssumme als Zustandssumme eines klassischen statistischen Systems in vier Raumdimensionen auf, das sich in einer neuen "Zeit", der Simulationszeit t, entsprechend den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen entwickelt. Aus der statistischen Mechanik weiß man folgendes: Das kanonische Ensemblemittel entspricht im thermodynamischen Limes dem mikrokanonischen Mittel bei konstanter Energie $E = \bar{E}$. Dieses Mittel entspricht wiederum unter der Annahme einer ergodischen Trajektorie dem zeitlichen Mittel der Observablen

$$\langle O \rangle_{\text{kan.}}(\beta) \underset{\text{Therm. Lim.}}{\longrightarrow} \Big[\langle O \rangle_{\text{mic.}}\Big]_{E=\bar{E}(\beta)} \underset{\text{Ergod.}}{\longrightarrow} \lim_{T\to\infty} \tfrac{1}{T}\int_0^T d\mathrm{t}\; O(\mathrm{t}).$$

Damit die Zustandssumme als klassische Zustandssumme interpretierbar ist, müssen noch zusätzliche Felder $H_\mu(n)$ eingeführt werden, die als konjugierte Impulsfreiheitsgrade zu den Linkvariablen interpretiert werden. Dementsprechend gilt

$$H_\mu(n) = \sum_a h_\mu^a(n) T^a, \tag{4.11}$$

wobei die Felder $h_\mu^a(n)$ reelle gaußverteilte Felder mit Erwartungswert eins sind, und die T^a die Generatoren der $SU(3)$. Man geht von der Zustandssumme (3.34) aus und integriert die Hilfsfelder auf folgende Weise:

$$\begin{aligned} Z &= \int DH\; DU\; \exp\Big\{-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\, H^2 - S_G[U] + \frac{N_f}{4}\mathrm{Tr}\,\ln K[U]\Big\} \\ &= \int DH\; DU\; \exp\{-\mathcal{H}[H,U]\}. \end{aligned} \tag{4.12}$$

$\mathcal{H}$ stellt die klassische Hamiltonfunktion dar. Die Bewegungsgleichung der Linkvariablen hat die Form

$$\dot{U}_\mu(n) = iH_\mu(n)U_\mu(n). \tag{4.13}$$

Der Punkt bezeichnet die Ableitung nach der Simulationszeit t. Diese Gleichung garantiert, daß die Linkvariablen Elemente der $SU(3)$ bleiben, und liefert im Kontinuum die Hamiltonsche Bewegungsgleichung des Eichfeldes $A_\mu^a(x)$

$$-g\dot{A}_\mu^a(x) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial h_\mu^a(x)}. \tag{4.14}$$

Für die zweite Bewegungsgleichung der Hilfsfelder $H_\mu(n)$ nutzt man aus, daß die Energie eine Konstante der Bewegung sein soll. Man leitet sie aus der Bedingung $\dot{\mathcal{H}} = 0$ ab. $\dot{H}_\mu(n)$ wird implizit definiert durch

$$0 = \dot{\mathcal{H}} = \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr}\, H_\mu(n)\dot{H}_\mu(n) + \frac{d}{d\mathrm{t}} S_G[U] - \frac{N_f}{4}\mathrm{Tr}\,\frac{1}{K^\dagger[U]K[U]}\frac{d}{d\mathrm{t}}(K^\dagger[U]K[U]). \tag{4.15}$$

Details zur Herleitung von $\dot{H}_\mu(n)$ befinden sich in Anhang B.1. Die Bewegungsgleichungen werden dann diskretisiert und mit Hilfe eines modifizierten Leapfrog-Algorithmus integriert. Nach einer Simulationszeit von $\Delta\mathrm{t} \approx 1$ kommt man so zu einer neuen Konfiguration. MD-Algorithmen haben den Vorteil einer schnellen Bewegung im Konfigurationsraum.

Durch die Diskretisierung der Bewegungsgleichungen in Zeitintervalle $\delta\mathrm{t}$ treten Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(\delta\mathrm{t}^2)$ auf. Damit man nicht in jedem MD-Schritt alle Elemente der inversen Fermionmatrix $K^\dagger K$ berechnet werden müssen, wird in (4.15) die inverse Fermionmatrix mit Hilfe von zwei Pseudofermionfelder ϕ, ϕ^* approximiert. Die Matrix wird ersetzt durch

$$(K^\dagger[U]K[U])^{-1}_{n,m} \longrightarrow X_n X^*_m \qquad \text{mit} \qquad X_n = K[U]^{-1}_{n,m} R_m = (K^\dagger K[U])^{-1}_{n,m}\phi_m. \quad (4.16)$$

Der Vorteil liegt darin, daß die Fermionmatrix nun nur noch bezüglich des Vektors ϕ_n invertiert werden muß, was mit dem Verfahren der konjugierten Gradienten durchgeführt werden kann (siehe z.B. [20]). Die Pseudofermionfelder werden in jedem MD-Schritt gemäß (4.10) zufällig gewählt.

4.1.4 Der Ablauf des Algorithmus

Der von Gottlieb und Toussaint [21] vorgeschlagene Algorithmus ist ein Hybrid-Algorithmus, der die MD-Bewegung im Konfigurationsraum mit einem stochastischen Update-Verfahren nach dem Prinzip des Wärmebades verbindet und so Ergodizität gewährleistet. Die Schritte des Algorithmus im einzelnen sind:

1. Generiere ein Hilfsfeld $H_\mu(n)$ und starte mit einem Leapfrog-Schritt der Länge $\delta\mathrm{t}\left(\frac{1}{2}-\frac{N_f}{8}\right)$ für die Linkvariablen $U_\mu(n)$:
$$U_\mu(n)\left[\mathrm{t}+\delta\mathrm{t}\left(\frac{1}{2}-\frac{N_f}{8}\right)\right] = \exp\left(i\delta\mathrm{t}\left(\frac{1}{2}-\frac{N_f}{8}\right)H_\mu(n)[\mathrm{t}]\right)U_\mu(n)\,[\mathrm{t}]\,.$$
2. Generiere ein Pseudofermionfeld ϕ_n:
$$\phi = K^\dagger\left[\mathrm{t}+\delta\mathrm{t}\left(\frac{1}{2}-\frac{N_f}{8}\right)\right]\ R.$$
3. Berechne $U_\mu(n)$ zur Zeit $\mathrm{t}+\delta\mathrm{t}/2$ (halber Leapfrog-Schritt):
$$U_\mu(n)\left[\mathrm{t}+\frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right] = \exp\left(i\delta\mathrm{t}\left(\frac{N_f}{8}\right)H_\mu(n)[\mathrm{t}]\right)\cdot U_\mu(n)\left[\mathrm{t}+\delta\mathrm{t}\left(\frac{1}{2}-\frac{N_f}{8}\right)\right].$$
4. Berechne X mit der Methode der konjugierten Gradienten:
$$X = \frac{1}{K^\dagger[U]\left[\mathrm{t}+\frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right]K[U]\left[\mathrm{t}+\frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right]}\ \phi.$$
5. Berechne die Ableitung der Hilfsfelder $\dot{H}_\mu(n)\left[\mathrm{t}+\frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right]$ wie in Anhang B.1.
6. Berechne die Hilfsfelder $H_\mu(n)\,[\mathrm{t}+\delta\mathrm{t}]$ (voller Leapfrog-Schritt):
$$H_\mu(n)\,[\mathrm{t}+\delta\mathrm{t}] = H_\mu(n)\,[\mathrm{t}] + \delta\mathrm{t}\dot{H}_\mu(n)\left[\mathrm{t}+\frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right].$$

7. Solange dies nicht der letzte MD-Schritt ist, führe einen vollen Leapfrog-Schritt für die Linkvariablen $U_\mu(n)$ durch:

$$U_\mu(n)\left[\mathsf{t}+\delta\mathsf{t}\left(\frac{1}{2}-\frac{N_f}{8}\right)+\delta\mathsf{t}\right]=$$
$$\exp\left(i\delta\mathsf{t}\left(1-\frac{N_f}{8}\right)H_\mu(n)[\mathsf{t}+\delta\mathsf{t}]\right)U_\mu(n)\left[\mathsf{t}+\frac{1}{2}\delta\mathsf{t}\right].$$

8. Wiederhole die Schritte 2 bis 7 genau $N-1$ mal. In der N-ten Iteration lasse man Schritt 7 aus und berechne die endgültigen Linkvariablen $U_\mu(n)\,[\mathsf{t}+N\delta\mathsf{t}]$ mit einem halben Leapfog-Schritt:

$$U_\mu(n)\,[\mathsf{t}+N\delta\mathsf{t}]=\exp\left(i\frac{\delta\mathsf{t}}{2}H_\mu(n)[\mathsf{t}+N\delta\mathsf{t}]\right)U_\mu(n)\left[\mathsf{t}+\left(N-\frac{1}{2}\right)\delta\mathsf{t}\right].$$

Wie bereits erwähnt, ist der Hybrid-R-Algorithmus aufgrund der Diskretisierung der Simulationszeit nicht exakt, sondern die Observablen sind mit Fehlern der Ordnung $\mathcal{O}(\delta\mathsf{t}^2)$ behaftet. Nach einer Studie der JLQCD Kollaboration [22] erhält man akzeptable Fehler, wenn man $\delta\mathsf{t}$ als halbe Quarkmasse wählt ($\delta\mathsf{t}\approx m/2$).
Für $N_f=4$ existiert eine exakte Variante des Algorithmus, der Hybrid-ϕ-Algorithmus. In ihm ist es möglich die Pseudofermionfelder während der MD-Schritte festzuhalten. Die Diskretisierungsfehler können dann anschließend durch eine Metropolis-Abfrage kompensiert werden, d.h. die aus der MD-Bewegung hervorgehende Konfiguration wird als Vorschlag für eine neue Konfiguration angesehen und nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit akzeptiert. Diese hängt von der Energieänderung $\delta\mathcal{H}$ ab und garantiert die richtige Verteilung der Konfigurationen (4.2). Hier muss die Anzahl der MD-Schritte so optimiert werden, daß einerseits eine hohe Akzeptanz der neuen Konfigurationen, andererseits jedoch eine schnelle Bewegung durch den Konfigurationsraum gewährleistet ist.

4.2 Die Multi-Histogramm-Methode

Mit MC-Simulationen werden Observablen für bestimmte Parameter $(a_1, a_2, \ldots)$ berechnet. Mit dem von Ferrenberg und Swendsen vorgeschlagenen Verfahren [23] ist es möglich auf andere Parameter $(a'_1, a'_2, \ldots)$ umzugewichten, um damit $O(a_1, a_2, \ldots)$ als Funktion der Parameter zu erlangen. Als Voraussetzung müssen die Parameter jedoch linear in die Wirkung eingehen, und die zugehörigen Operatoren müssen meßbar sein. In der QCD ist dies für die Wilson-Wirkung mit dem Parameter β der Fall. Es gilt $S_G(\beta)\equiv\beta\mathcal{S}_G$, und $\mathcal{S}_G$ ist meßbar. Die Idee des Verfahrens ist es, die Information der Wirkungsverteilung auszunutzen. Die Zustandssumme läßt sich schreiben als

$$Z(\beta)=\sum_{c\in\mathbb{K}}\exp\{-\beta\mathcal{S}_G[c]-S_F[c]\}=\sum_{\mathcal{S}_G}W(\mathcal{S}_G)\exp\{-\beta\mathcal{S}_G[c]\} \tag{4.17}$$

mit der von β unabhängigen Zustandsdichte $W(\mathcal{S}_G)$. Damit ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der gluonischen Wirkung bei der Kopplung β gegeben durch

$$P_\beta(\mathcal{S}_G) = \frac{1}{Z(\beta)} W(\mathcal{S}_G) \exp\{-\beta \mathcal{S}_G\}. \tag{4.18}$$

Für große Simulationszeiten sollte das Histogramm von $\mathcal{S}_G$ gegen diese Verteilung streben. Faßt man die Observable O auch als Funktion von $\mathcal{S}_G$ auf, so gelingt das Umgewichten auf β' auf die folgende Weise:

$$\begin{aligned} O(\beta') &= \sum_{\mathcal{S}_G} O(\mathcal{S}_G) P_{\beta'}(\mathcal{S}_G) \;=\; \sum_{\mathcal{S}_G} O(\mathcal{S}_G) P_\beta(\mathcal{S}_G) \frac{P_{\beta'}(\mathcal{S}_G)}{P_\beta(\mathcal{S}_G)} \\ &= \sum_{\mathcal{S}_G} O(\mathcal{S}_G) P_\beta(\mathcal{S}_G) \frac{Z(\beta)}{Z(\beta')} \exp\{-y(\beta' - \beta)\mathcal{S}_G\} \\ &= \sum_{\mathcal{S}_G} O(\mathcal{S}_G) \frac{P_\beta(\mathcal{S}_G) \exp\{-(\beta' - \beta)\mathcal{S}_G\}}{\sum_{\mathcal{S}_G} \exp\{-(\beta' - \beta)\mathcal{S}_G\}}. \end{aligned} \tag{4.19}$$

Die Multi-Histogramm-Methode [24] stellt die Erweiterung dieses Verfahrens auf mehrere MC-Datensätze an verschiedenen Stellen des Parameter-Raumes dar und macht so aus dem etwas unsicheren Extrapolations-Verfahren ein sicheres Interpolations-Verfahren. Für r MC-Simulationen der Länge n_k $(k = 1, \ldots, r)$, auf den Kopplungen β_k und mit den Wirkungs-Histogrammen $N_k(\mathcal{S}_G)/n_k$ erhält man r verschiedene Schätzungen $W_k(\mathcal{S}_G)$ für die Zustandsdichte. Ein gewichtetes Mittel der Zustandsdichten ist

$$\overline{W(\mathcal{S}_G)} = \sum_{k=1}^{r} p_k(\mathcal{S}_G) W_k(\mathcal{S}_G), \qquad \sum_{k=1}^{r} p_k = 1, \tag{4.20}$$

mit den Gewichten $p_k(\mathcal{S}_G)$. Dieser Ausdruck liefert eine bessere Schätzung. Es läßt sich zeigen, daß die Fehler minimiert werden, wenn man die Gewichte

$$p_k(\mathcal{S}_G) = \frac{n_k(1 + 2\tau_k)^{-1} \exp\{-(\beta_k \mathcal{S}_G + F_k\}}{\sum_{k=1}^{r} n_k(1 + 2\tau_k)^{-1} \exp\{-(\beta_k \mathcal{S}_G + F_k\}}, \tag{4.21}$$

wählt mit τ_k als Autokorrelationszeit und F_k als freie Energie des k-ten Datensatzes. Mit diesen Gewichten ergeben sich die Schätzungen

$$\overline{W(\mathcal{S}_G)} = \frac{\sum_{k=1}^{r} N_K(\mathcal{S}_G)(1 + 2\tau_k)^{-1}}{\sum_{k=1}^{r} n_k(1 + 2\tau_k)^{-1} \exp\{-(\beta_k \mathcal{S}_G + F_k\}} \tag{4.22}$$

und

$$\overline{Z(\beta_k)} = \sum_{\mathcal{S}_G} \overline{W(\mathcal{S}_G)} \exp\{-\beta_k \mathcal{S}\} \;=\; \exp\{-F_k\}. \tag{4.23}$$

Die Werte F_k werden selbstkonsistent durch Iteration der Gleichungen (4.22) und (4.23) gewonnen. Das Umgewichten läuft wieder wie in (4.19). Die Wirkungsverteilung $P_{\beta'}(\mathcal{S}_G)$ wird jetzt jedoch aus den verbesserten Schätzungen (4.22) und (4.23) ermittelt.

4.3 Der Jackknife-Fehler

Aufgrund der in Abschnitt 4.1.1 schon erwähnten Korrelation der Daten sind in dieser Arbeit alle Fehler der Simulations-Daten mit dem Jackknife-Verfahren berechnet worden. Der Jackknife-Fehler ist eine verbesserte Schätzung des Fehlers für korrelierte Daten, besser als der naive Fehler. Hierzu werden die Daten in n Datensätze der Länge m unterteilt und n Mittelwerte $\bar{O}_i$ über $(n-1)$ dieser Datensätze berechnet, indem jeweils ein Datensatz ausgelassen wird. Daraus werden die sogenannten Pseudowerte $J_i(O)$ des Jackknife berechnet

$$J_i(O) = N\bar{O} - (N-1)\bar{O}_i, \tag{4.24}$$

wobei $\bar{O}$ den Mittelwert über alle Datensätze bezeichnet. Solange die Autokorrelationszeit τ kleiner als die Länge m der Datensätze ist, sollten die $J_i(O)$ statistisch unabhängig sein, und man erhält Schätzungen für den Erwartungswert der Observablen $\bar{J}$ und den verbesserten Fehler ΔJ durch

$$\overline{J(O)} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} J_i \qquad \text{und} \qquad \Delta J(O) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{k}\left(J_i(O) - \overline{J(O)}\right)^2}{N(N-1)}}. \tag{4.25}$$

4.4 Durchgeführte Simulationen

Die Simulationen zu dieser Arbeit wurden mit dem oben beschriebenen Hybrid-R-Algorithmus durchgeführt. Die dabei notwendigen Matrix-Inversionen wurden mit dem Verfahren der konjugierten Gradienten durchgeführt. Simuliert wurden dynamische staggered Fermionen mit zwei bzw. drei Flavour-Freiheitsgraden. Die verwendeten Simulations-Parameter, d.h. die Zeit-Diskretisierung der MD-Bewegungsgleichungen δt, die Anzahl der MD-Schritte N sowie die Residuen r des Algorithmus der konjugierten Gradienten sind in der Tabelle 4.1 zusammengestellt. Die Anzahl der MD-Trajektorien pro (β, m)-Kombination beträgt im Fall $N_f = 2$ zwischen 10^4 und 10^5. Im Fall $N_f = 3$ beträgt sie dagegen zwischen 10^4 und $3 \cdot 10^4$ je nach Entfernung vom pseudokritischen Punkt. Pro Quarkmasse m wurde bei mehren Kopplungen β simuliert und dann mit der Multi-Histogramm-Methode interpoliert. Wie in Abbildung 2.3 eingezeichnet, wurde im Fall $N_f = 2$ der kritische Punkt für schwere Massen untersucht. Daher war es möglich, bis zu einer Gittergröße von $24^3 \cdot 4$ zu gehen, während für $N_f = 3$ und leichte Massen die maximale Gittergröße $16^3 \cdot 4$ betrug. Der Grund ist das drastische Ansteigen der Inversions-Schritte des Algorithmus der konjugierten Gradienten (für $m = 0$ wird die Fermion-Matrix singulär). Die Gittergröße in zeitlicher Richtung lag in allen Simulationen bei $N_\tau = 4$. Durchgeführt wurden die Simulationen auf verschieden QUADRICS-Parallelrechnern der Generationen APE 100 und APE 1000 mit 16, 32, 128, oder 256 Prozessoren.

	$N_f = 2$	$N_f = 3$
δt	0,02	0,015
N	30	40
r	10^{-9}	10^{-9}

Tabelle 4.1: Simulations-Parameter

Kapitel 5

Numerische Resultate

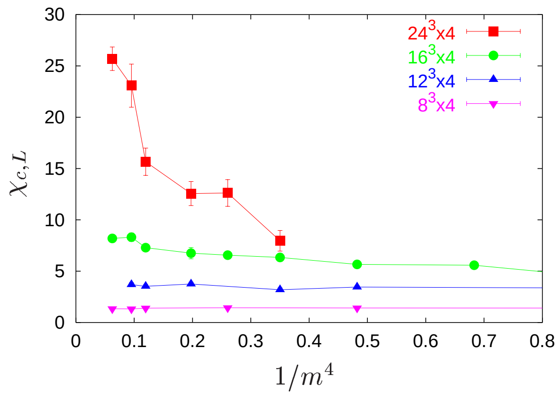
In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der MC-Simulation dargestellt. Dabei sind alle Größen in Gittereinheiten angegeben. Alle Fehler der gemessenen Observablen sind mit der Jackknife Methode bestimmt worden.

5.1 2-Flavour-QCD bei schweren Quarkmassen

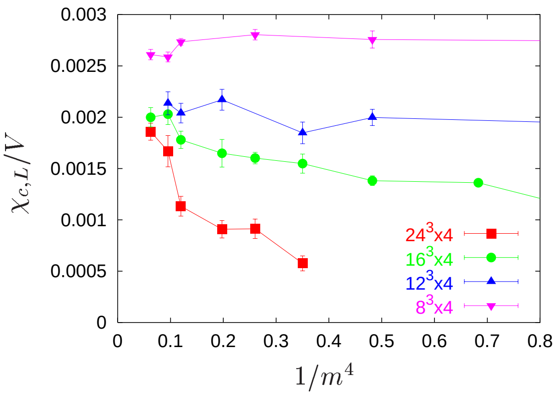
Die Untersuchung des kritischen Verhaltens der Theorie hängt entscheidend davon ab, daß man die richtigen Skalenvariablen und Skalenoperatoren findet. Nur sie zeigen das richtige universelle Skalenverhalten. Da das unten beschriebene Verfahren zur Bestimmung der Skalenoperatoren die Kenntnis des kritischen Punktes voraussetzt, wurde zuerst der kritische Punkt (β_c, m_c) durch Auswertung der gemessenen Operatoren bestimmt. Die Multi-Histogramm-Methode erlaubt ein Umgewichten der Observablen in β nicht aber in m. Das Problem war also die Bestimmung der kritischen Masse m_c anhand der Simulationen bei verschiedenen Werten des Masseparameters. Simuliert wurden die Massen $m = 1.1$, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 1.7, 1.8, 2.0. Daraufhin wurde eine Näherung für die Skalenvariablen und Skalenoperatoren bestimmt, mit deren Hilfe die Universalitätsklasse der Theorie bestimmt wurde.

5.1.1 Bestimmung des kritischen Punktes

Analyse der Suszeptibilität des Polyakov-Loops
Der Polyakov-Loop ist der Ordnungsparameter der reinen $SU(3)$-Eichtheorie. Der Ordnungsparameter für schwere Massen sollte daher einen großen Anteil des Polyakov-Loops enthalten. Da der Polyakov-Loop nach der Hoppingparameter-Entwicklung (3.49) mit einem Faktor $h \propto 1/m^4$ in die effektive Wirkung eingeht, ist zu vermuten, daß die Skalenvariablen einen Term proportional $1/m^4$ enthalten. Eine erste Abschätzung des



(a)



(b)

Abbildung 5.1: (a) *Polyakov-Loop-Suszeptibilität als Funktion der inversen Quarkmasse,* (b)*Polyakov-Loop-Suszeptibilität pro Volumen als Funktion der inversen Quarkmasse.*

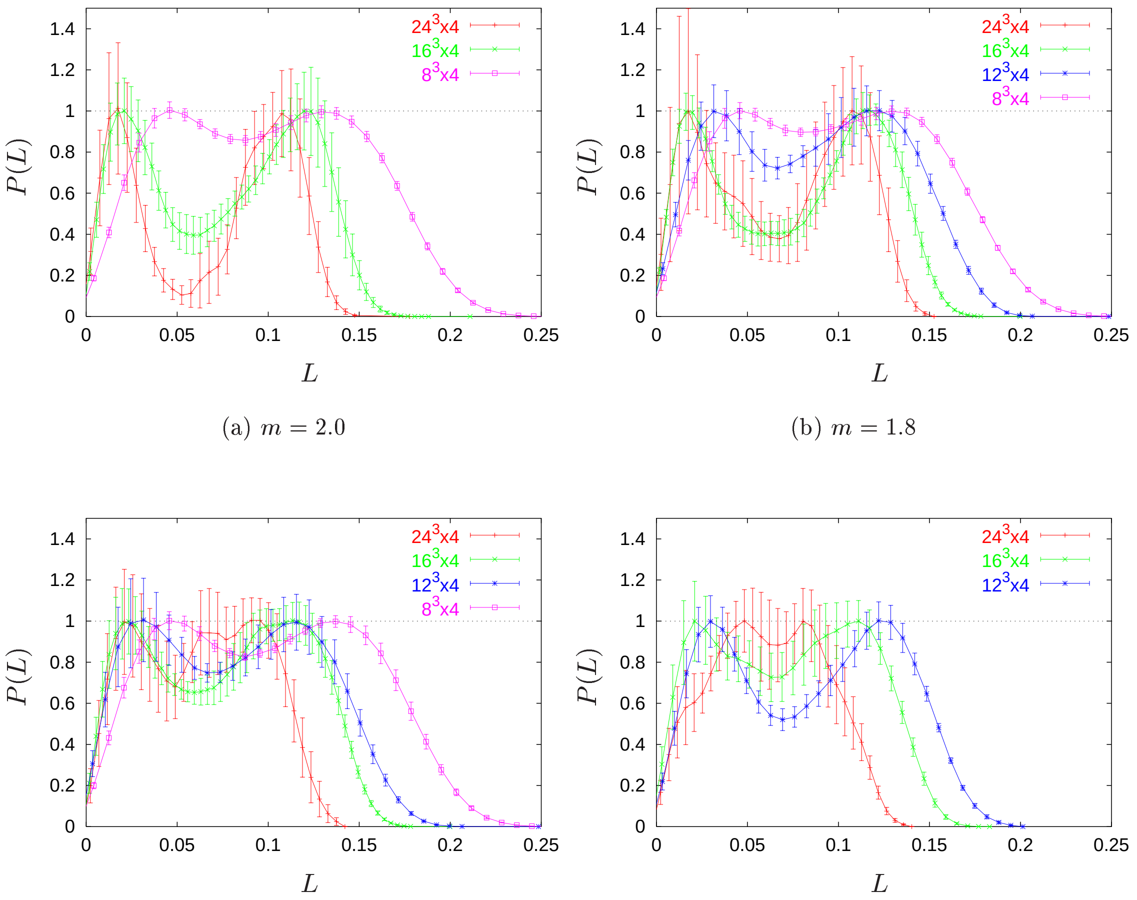
kritischen Punktes erhält man daher aus der Polyakov-Loop-Suszeptibilität (3.33). Für einen Phasenübergang erster Ordnung erwartet man ein skalieren von $\chi_{c,L}$ mit dem Volumen ($\gamma/\nu = d$), während man im Crossover Bereich kein Skalenverhalten mehr erwartet ($\gamma/\nu = 0$). In der Abbildung 5.1(a) ist die Suszeptibilität $\chi_{c,L}$ gegen $1/m^4$ aufgetragen. Bei einer Masse von $m = 1.3$ ($1/m^4 \approx 0.35$) stimmen die Suszeptibilitäten der Gitter $24^3 \times 4$ und $16^3 \times 4$ annähernd überein. In der Abbildung 5.1(b) ist die Suszeptibilität mit 1/Volumen normiert. Hier stimmen die beiden größten Gitter bei der Masse $m = 2.0$ ($1/m^4 \approx 0.08$) innerhalb der Fehler überein. Die größte Änderung zeigen die Suszeptibilitäten zwischen den Massen $m = 1.7$ ($1/m^4 \approx 0.1$) und $m = 1.8$ ($1/m^4 \approx 0.12$). Aus der Analyse der Polyakov-Loop-Suszeptibilität ergibt sich daher eine kritische Masse von

$$m_c = 1.75 \binom{+0.25}{-0.45}. \tag{5.1}$$

Die beiden kleinen Gitter $8^3 \times 4$ und $12^3 \times 4$ weisen sehr große Finite-Size-Effekte auf und weichen stark vom erwarteten Skalenverhalten ab.

Analyse der Oberflächenspannung

Als ein weiteres Kriterium zur Ermittlung der kritischen Masse kann die Oberflächenspannung herangezogen werden. Die Oberflächenspannung wurde aus den Histogrammen des Polyakov-Loops ermittelt, die in Abbildung 5.2 dargestellt sind. Diese Histogramme wurden in der Kopplung so umgewichtet und normiert, daß für die Peakhöhen $P_{\max,1}$ und $P_{\max,2}$ die Bedingung $P_{\max,1} = P_{\max,2} = 1$ erfüllt ist. Ferner wurde durch eine Mittelung der relativen Häufigkeit über jeweils drei benachbarte Polyakov-Loop-Werte eine Glättung der Verteilung erzielt. Aufgrund der periodischen Randbedingungen müssen sich immer mindestens zwei Oberflächen im System ausbilden, welche die geordnete und die ungeordnete Phase trennen. Mit Hilfe von (1.70) gilt dann für die Oberflächenspannung σ



(a) $m = 2.0$

(b) $m = 1.8$

(c) $m = 1.7$

(d) $m = 1.5$

Abbildung 5.2: *Geglättete Histogramme des Polyakov-Loops für verschiedene Gitter und nackte Quarkmassen. Alle Histogramme sind auf gleiche Peakhöhen umgewichtet und normiert worden.*

Gitter $N_\sigma^3 \times N_\tau$	σ/T_c^3 $m=2.0$	$m=1.8$	$m=1.7$	$m=1.5$
$8^3 \times 4$	0.0192(29)	0.0136(26)	0.0240(23)	
$12^3 \times 4$		0.0180(39)	0.0161(36)	0.0361(77)
$16^3 \times 4$	0.0281(90)	0.0282(49)	0.0133(44)	0.0104(67)
$24^3 \times 4$	0.0311(40)	0.0141(53)	0.0052(23)	0.0015(20)
$\infty \times 4$	0.0231(24)	0.0087(52)	-0.0025(27)	-0.016(17)

Tabelle 5.1: *Oberflächenspannungen aus den Polyakov-Loop-Histogrammen für verschiedene Gittergrößen und Quarkmassen. Bei der Extrapolation zum unendlichen Volumen wurde für die Massen* $m = 2.0,\ 1.8$ *der Ansatz (5.3) und für die Massen* $m = 1.7,\ 1.5$ *der Ansatz (5.4) verwendet.*

einer endlichen Oberfläche

$$\left(\frac{\sigma}{T_c^3}\right)_V = -\frac{1}{2}\left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^2 \ln\left(P_{\text{min}}\right). \tag{5.2}$$

Die so bestimmten Oberfächenspannungen wurden mit dem Ansatz aus Ref. [25]

$$\left(\frac{\sigma}{T_c^3}\right)_V = \left(\frac{\sigma}{T_c^3}\right) - \left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^2 \left[c + \frac{1}{4}\ln N_\sigma\right] \tag{5.3}$$

zum unendlichen Volumen extrapoliert. Dieser Ansatz berücksichtigt außer den Fluktuationen des Polyakov-Loops auch noch die Invarianz des Systems unter einer Translation der Oberflächen in Richtung ihrer Flächennormalen. Für die Massen $m = 1.5$, und 1.7 ergaben sich jedoch unphysikalische negative Werte. Das ist darauf zurückzuführen, daß der Ansatz (5.3) nur im Bereich eines Phasenüberganges erster Ordnung gilt, bzw. nur wenn es wirklich zu der Ausbildung einer gemischten Phase im Systems kommt. Die Massen $m = 1.5$, und 1.7 wurden daher mit dem Ansatz

$$\left(\frac{\sigma}{T_c^3}\right)_V = \left(\frac{\sigma}{T_c^3}\right) - cN_\sigma^{-3/2} \tag{5.4}$$

zum unendlichen Volumen extrapoliert, welcher nur die gaußverteilten Fluktuationen $\propto V^{-1/2}$ des Polyakov-Loops berücksichtigt. Mit diesem Ansatz ergaben sich Werte, die mit Null verträglich sind. Alle Oberflächenspannungen sind in der Tabelle 5.1 zusammengestellt. Die Oberflächenspannung des unendlichen Volumens für die Masse $m = 2.0$ ist nur wenig kleiner als die Oberflächenspannung der reinen $SU(3)$-Eichtheorie $(\sigma/T_c^3) = 0.0295(21)$ [26], während sie für $m = 1.8$ schon wesentlich geringer ist. Da die Oberflächenspannung bei der kritischen Masse verschwindet, ist die Masse $m = 1.7$ als untere Grenze für m_c anzusehen. Mit verschiedenen Extrapolations-Ansätzen ergaben sich für m_c die folgenden Näherungen:

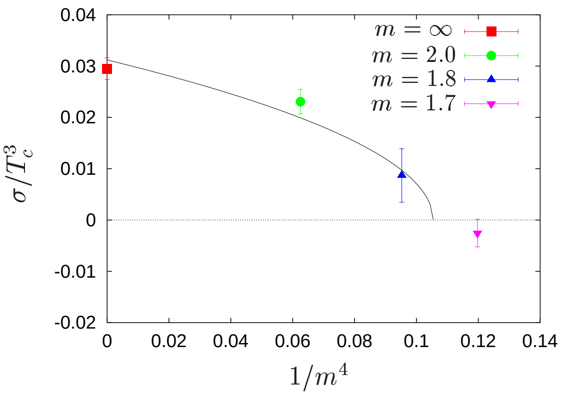


Abbildung 5.3: *Oberflächenspannung im unendlichen Volumen als Funktion der inversen Quarkmasse mit Quadratwurzel-Fit.*

Ansatz		Wertebereich	Näherung
$(\sigma/T_c^3)(m) = a(\frac{1}{m^4}) + b$	(Gerade)	$m \in [2.0, 1.8]$	$m_c = 1.719(46)$
$(\sigma/T_c^3)(m) = a(\frac{1}{m_c^4} - \frac{1}{m^4})^{1/2}$	(Quadratwurzel)	$m \in [\infty, 1.8]$	$m_c = 1.755(22)$

Der Quadratwurzel-Fit ist in der Abbildung (5.3) gezeigt. Insgesamt ergab sich mit diesen Näherungen eine kritische Masse von

$$m_c = 1.745(46). \tag{5.5}$$

Analyse der Kumulante B_4

Ein ähnliches Ergebnis bekommt man aus der Analyse der Kumulanten der Polyakov-Loop-Verteilungen. In der Abbildung 5.4 ist die Größe

$$B_{4,L}(\beta, m) = \frac{\langle(\delta L)^4\rangle}{\langle(\delta L)^2\rangle^2} \tag{5.6}$$

mit

$$\delta L = L - \langle L \rangle \tag{5.7}$$

gegen $1/m^4$ aufgetragen. Der Polyakov-Loop L wurde in (3.32) definiert. Dabei ist zu den Kopplungen $\beta = \beta_{c,L}$ umgewichtet worden, die durch das Maximum der Polyakov-Loop-Suszeptibilität bestimmt wurden. Nach (1.59) ist die Kumulante B_4 am kritischen Punkt unabhängig vom Volumen. Die Kumulanten der verschiedenen Gitter sollten sich daher im kritischen Punkt schneiden. Wie schon bei der Analyse der Suszeptibilitäten zeigt sich auch hier, daß die beiden kleinsten Gitter zu große Korrekturen zum Skalenverhalten aufweisen. Sie bilden mit sich selbst und dem $16^3 \times 4$ Gitter keinen Schnittpunkt aus. Ermittelt man den Schnittpunkt der beiden größten Gitter durch lineare Interpolation, so erhält man als Abschätzung für die kritische Masse

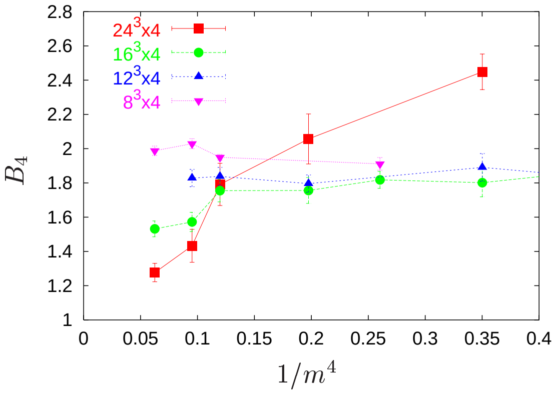


Abbildung 5.4: *Die vierte Kumulante der Polyakov-Loop-Verteilung als Funktion der inversen Quarkmasse.*

$$m_c = 1.718(66). \tag{5.8}$$

Die beste Schätzung für die kritische Masse aus den vorangegangenen Analysen der Oberflächenspannung und der Kumulante ist daher das Mittel aus (5.5) und (5.8)

$$m_c = 1.738(35). \tag{5.9}$$

Pionmassen m_π und Saitenspannungen[1] σ für das $16^3 \times 4$ Gitter und der staggered Fermion-Wirkung wurden von Lütgemeier [27] bestimmt. Dies allerdings nur bei kleineren Quarkmassen. Eine logarithmische Extrapolation der Daten für $m = 0.6$ und 1.0 zu der kritischen Masse (5.9) lieferte eine kritische Pionmasse von $(m_\pi/\sqrt{\sigma})_c = 5.96(11)$ in Einheiten der Saitenspannung.

[1] σ ist hier nicht zu verwechseln mit der früher diskutierten Oberflächenspannung.

Gitter N_σ^3	$\times$	N_τ	Fitparameter a_L	b_L
8^3	$\times$	4	0.0072(264)	5.6819(24)
12^3	$\times$	4	-0.0856(69)	5.6891(11)
16^3	$\times$	4	-0.1259(56)	5.6905(6)
24^3	$\times$	4	-0.1461(32)	5.6916(2)

Tabelle 5.2: *Fitparameter für den Ansatz der pseudokritischen Kopplungen.*

Analyse der pseudokritischen Kopplungen

Um die kritische Kopplung zu bestimmen, wurden in der Abbildung 5.5 die pseudokritischen Kopplungen $\beta_{c,L}$ gegen $1/m^4$ aufgetragen. $\beta_{c,L}$ wurde anhand des Maximums der Polyakov-Loop-Suszeptibilität

$$\chi_{L,max} = \chi_L(\beta_{c,L}) \tag{5.10}$$

mit Hilfe der Multi-Histogramm-Methode bestimmt. Die für $1/m^4 = 0$ eingezeichneten pseudokritischen Kopplungen wurden aus Ref. [28] entnommen. Wie man sieht, werden die Daten in dieser Darstellung in guter Näherung vom asymptotischen Bereich $m \to \infty$ bis in den Bereich der kritischen Masse durch eine Gerade beschrieben. Für die verschiedenen Gitter sind Fits mit dem Ansatz

$$\beta_{c,L}(m) = a_L \frac{1}{m^4} + b_L \tag{5.11}$$

durchgeführt worden, deren Fitparameter in der Tabelle 5.2 zusammengestellt sind. Nimmt man $\beta_{c,24}(m_c)$ als Näherung für die kritische Kopplung $\beta_{c,\infty}(m_c)$, so ergibt sich eine endgültige Schätzung für den kritischen Punkt von

$$(\beta_c, m_c) = (5.6756(5), 1.738(35)). \tag{5.12}$$

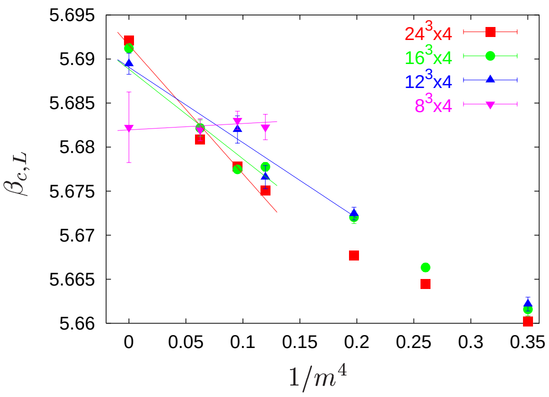


Abbildung 5.5: *Die pseudokritischen Kopplungen als Funktion der inversen Quarkmasse.*

5.1.2 Bestimmung der Skalenoperatoren und Skalenvariablen

Zur Bestimmung der richtigen Skalenoperatoren und Skalenvariablen ist eine Variablentransformation der Wirkung durchgeführt worden, wie dies für den Phasenübergang von Wasser schon in Ref. [29] gemacht wurde. Unter der Annahme, daß man das kritische Verhalten des Systems durch zwei relevante Skalenvariablen beschreiben kann, wurde die Wirkung durch einen energieartigen Operator $\mathcal{E}$ und einen magnetisierungsartigen Operator $\mathcal{M}$ ausgedrückt

$$S = \beta \mathcal{S}_G[U] - \frac{N_F}{4} \mathrm{Tr}\, \ln K[U](m) = \tau \mathcal{E}[U] + \xi \mathcal{M}[U]. \tag{5.13}$$

Dabei bezeichnet τ die temperaturartige Skalenvariable und ξ die symmetriebrechende. Es liegt nahe, für die Skalenoperatoren eine Linearkombinationen der alten Operatoren anzusetzen [29, 6, 30, 31]. Da der Operator $\mathrm{Tr}\,\ln K[U](m)$ jedoch nur mit sehr großem Aufwand zu bestimmen ist, wurden für die Skalenoperatoren die folgenden Ansätze gemacht

$$\mathcal{E} = \mathcal{S}_G + rL, \qquad \mathcal{M} = L + s\mathcal{S}_G \tag{5.14}$$

mit r und s als Mischungsparametern. Dabei ist zu beachten, daß der Polyakov-Loop L nicht direkt in die alte Wirkung eingeht. Die zugehörigen Skalenvariablen sind daher durch andere Mischungs-Parameter bestimmt. Hier wurden die Ansätze

$$\begin{aligned} \tau &= \beta - \beta_c + A(h - h_c), \\ \xi &= h - h_c + B(\beta - \beta_c) \end{aligned} \tag{5.15}$$

mit $h \equiv 1/m^4$ gemacht. Die zugrundeliegende $Z(2)$-Symmetrie der $3d$-Ising-, $3d$-$O(2)$- und $3d$-$O(4)$-Modelle, welche die in Frage kommenden Universalitätsklassen repräsentieren, bewirkt die Orthogonalität (im Sinne von statistischer Unabhängigkeit) von $\mathcal{E}$ und $\mathcal{M}$, d.h.

$$\langle \delta\mathcal{E}\delta\mathcal{M}\rangle = 0 \tag{5.16}$$

mit

$$\delta\mathcal{E} = \mathcal{E} - \langle\mathcal{E}\rangle\,, \qquad \delta\mathcal{M} = \mathcal{M} - \langle\mathcal{M}\rangle\,. \tag{5.17}$$

Als Konsequenz liegt die Koexistenzlinie in diesen Modellen auf der τ-Achse, und es gilt

$$\langle \delta\mathcal{E}\delta\mathcal{M}\rangle \propto \left.\frac{\partial\langle\mathcal{M}\rangle(\tau,\xi)}{\partial\tau}\right|_{\xi=0,\tau\geq 0} = 0. \tag{5.18}$$

Um dies zu gewährleisten wurde der Mischungsparameter B durch die Steigung der pseudokritischen Linie am kritischen Punkt bestimmt,

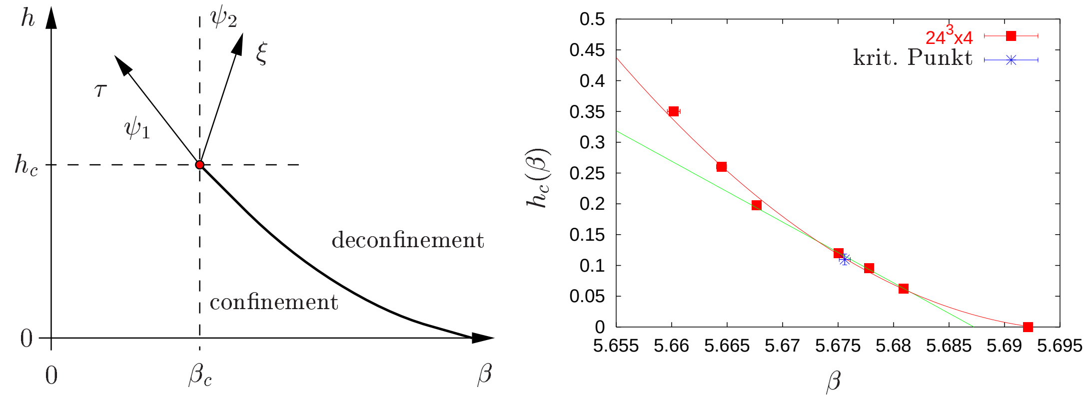
$$B = -\left.\frac{\partial h_c(\beta)}{\partial\beta}\right|_{\beta_c}. \tag{5.19}$$

In der Abbildung 5.6(a) sind die Richtungen der Skalenvariablen bezüglich der Koexistenzlinie eingezeichnet. In der Annahme, daß die Linie der pseudokritischen Kopplungen des größten Gitters eine gute Näherung für die Koexistenz-Linie liefert, wurde B aus ihr bestimmt. Ein Geraden-Fit mit den Daten der Masse $m = 2.0$, $m = 1.8$ und $m = 1.7$, wie in 5.6(b) gezeigt, ergab einen Mischungsparameter von $B = 9.8(4)$. Mit dem Ziel, einen Zusammenhang zwischen B und s herzustellen, kann die Bedingung (5.18) umgeschrieben werden

$$\begin{aligned} 0 \equiv \left(\frac{\partial\langle\mathcal{M}(0,0)\rangle}{\partial\tau}\right)_\xi &= \left\langle\frac{\partial\mathcal{M}}{\partial\beta}\right\rangle\left(\frac{\partial\beta}{\partial\tau}\right)_\xi + \left\langle\frac{\partial\mathcal{M}}{\partial h}\right\rangle\left(\frac{\partial h}{\partial\tau}\right)_\xi \\ &= \langle\delta\mathcal{M}\delta\mathcal{S}_G\rangle\left(\frac{\partial\beta}{\partial\tau}\right)_\xi + \langle\delta\mathcal{M}\delta(\bar\psi\psi)\rangle\left(\frac{\partial h}{\partial\tau}\right)_\xi\left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{m=m_c}. \end{aligned} \tag{5.20}$$

Hier hat man sich zu Nutze gemacht, daß die Ableitungen der Zustandssumme nach den Parametern β und h gerade die Operatoren S_G bzw. $\bar\psi\psi$ liefern. Die partiellen Ableitungen $\partial\beta/\partial\tau$ und $\partial h/\partial\tau$ können aus dem Ansatz (5.15) gewonnen werden. Es gilt

$$\left(\frac{\partial\beta}{\partial\tau}\right)_\xi = \frac{1}{1-AB}, \qquad \left(\frac{\partial h}{\partial\tau}\right)_\xi = -\frac{B}{1-AB}, \qquad \frac{\partial m}{\partial h} = -\frac{1}{4}m^5. \tag{5.21}$$



(a) (b)

Abbildung 5.6: (a)*Schematische Darstellung des Zusammenhangs zwischen der Koexistenz-Kurve und den Skalenvariablen. Die Winkel* ψ_1 *und* ψ_2 *bestimmen die Mischungsparametern* A *und* B *durch* $A = -\tan\psi_1$ *und* $B = -\tan\psi_2$*.* (b)*Pseudokritische Linie des* $24^3 \times 4$ *Gitters mit Parabel- und Geraden-Fit.*

Wird weiterhin der Ansatz (5.14) für den Skalenoperator $\mathcal{M}$ eingesetzt, so ergibt sich der gewünschte Zusammenhang

$$s = -\frac{\langle \delta L \delta \mathcal{S}_G \rangle + \frac{1}{4} m_c^5 B \left\langle \delta L \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle}{\langle (\delta \mathcal{S}_G)^2 \rangle + \frac{1}{4} m_c^5 B \left\langle \delta \mathcal{S}_G \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle}. \tag{5.22}$$

Für den korrekten Mischungsparameter s ist der Ausdruck auf der rechten Seite von (5.22) am kritischen Punkt auszuwerten. Da die Suszeptibilität der gluonischen Wirkung $\left\langle (\delta \mathcal{S}_G)^2 \right\rangle$ und auch die gemischten Suszeptibilitäten $\left\langle \delta L \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle$ und $\left\langle \delta \mathcal{S}_G \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle$ am kritischen Punkt divergieren, ist der Grenzwert $\beta \to \beta_c$ und $m \to m_c$ zu nehmen. Hier wurden als Näherung für s alle Erwartungswerte auf dem pseudokritischen Punkt des endlichen Gitters $24^3 \times 4$ ausgewertet. Dabei wurde zwischen den Massen $m = 1.7$ und $m = 1.8$ linear interpoliert. Auf diese Weise ergab sich ein Mischungsparameter s von

$$s = 0.67 \pm 2.48. \tag{5.23}$$

Ferner liefert die Bedingung (5.16) mit den Ansätzen (5.14) einen Zusammenhang zwischen den Mischungsparametern r und s

$$\begin{aligned} 0 \equiv \langle \delta \mathcal{E} \delta \mathcal{M} \rangle &= \left\langle \delta L \delta \mathcal{S}_G + r(\delta L)^2 + s(\delta \mathcal{S}_G)^2 + rsL\mathcal{S}_G \right\rangle \\ &= (1+rs) \langle \delta L \delta \mathcal{S}_G \rangle + r \left\langle (\delta L)^2 \right\rangle + s \left\langle (\delta \mathcal{S}_G)^2 \right\rangle. \end{aligned} \tag{5.24}$$

Zusammen mit (5.22) ergibt sich für r der Ausdruck

$$r = \frac{-\frac{1}{4} m_c^5 B \left[\left\langle \delta \mathcal{S}_G \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle \langle \delta L \delta \mathcal{S}_G \rangle - \left\langle (\delta \mathcal{S}_G)^2 \right\rangle \left\langle \delta L \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle \right]}{\langle (\delta L)^2 \rangle \langle (\delta \mathcal{S}_G)^2 \rangle - \langle \delta L \delta \mathcal{S}_G \rangle^2 + \frac{1}{4} m_c^5 B \left[\langle (\delta L)^2 \rangle \left\langle \delta \mathcal{S}_G \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle - \langle \delta L \delta \mathcal{S}_G \rangle \left\langle \delta L \delta(\bar{\psi}\psi) \right\rangle \right]}. \tag{5.25}$$

Für die Erwartungswerte gilt das gleiche wie schon beim Mischungsparameter s. Damit wurde für den Mischungsparameter r ermittelt

$$r = -0.223(43). \tag{5.26}$$

Wie man sieht, ist der Mischungsparameter s mit so großen Fehlern behaftet, daß man praktisch keine Aussage über ihn machen kann, während der Mischungsparameter r wesentlich genauer bestimmt wurde. Das liegt daran, daß die Fluktuationen in $\mathcal{E}$ durch den thermischen Exponenten a_t (siehe (1.19)) bestimmt werden, der viel kleiner ist als der symmetriebrechende Exponent a_h. Der Skalenoperator $\mathcal{E}$ kann nur das richtige singuläre Verhalten in der Systemlänge aufweisen, wenn sich die führenden singulären Terme in $\mathcal{S}_G$ und L, die beide durch a_h bestimmt werden, gegeneinander aufheben.

5.1.3 Bestimmung der Universalitätsklasse

Analyse des Skalenverhaltens von $\mathcal{E}$ und $\mathcal{M}$

Die kritischen Exponten sind durch das singuläre Verhalten der Erwartungswerte $\langle\mathcal{E}\rangle$ und $\langle\mathcal{M}\rangle$ bei Annäherung an den kritischen Punkt aus den Richtungen der Skalenvariablen bestimmt. Für eine Durchführung einer FSS-Analyse benötigt man die Werte der Suszeptibilitäten auf der τ-Achse. Möchte man den Exponenten δ bestimmen so auch auf der ξ-Achse. Dies gestaltet sich jedoch äußert schwierig, da die Multi-Histogramm-Methode nur das Umgewichten der Observablen in β-Richtung gestattet. Für jeden Masseparameter m (bzw. h) sind die Observablen auf die Kopplung umgewichtet worden, die durch $\xi = 0$ bestimmt ist. Um dann die Peakhöhen und deren Positionen zu bestimmen, wurden die Datenpunkte im Bereich des Maximums mit einer Gauß-Kurve gefittet. Da der Mischungsparameter s nicht genau bestimmt werden konnte, wurde angenommen, daß die Skalenoperatoren aus einer Drehung der Operatoren $\mathcal{S}_G$ und L hervorheben. Dies entspricht der Bedingung $r = -s$. Ebenso wurde bei den Mischungsparametern der Skalenvariablen $A = -B$ angenommen. Der unbestimmte Parameter A legt neben der ξ-Richtung die Einheit auf der τ-Achse fest, die jedoch bei der Untersuchung des Skalenverhaltens keine Rolle spielt. Die Ergebnisse sind in der Abbildung 5.7 zu sehen, und die zugehörigen Daten befinden sich in der Tabelle 5.3(a). Diese Daten wurden mit Ansätzen entsprechend (1.53) und (1.55) gefittet, wie dies in den Abbildungen 5.8(a) und 5.8(b) gezeigt wird. Es ergaben sich die kritischen Exponenten

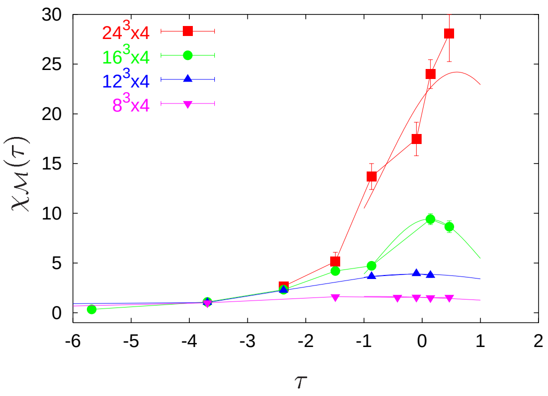
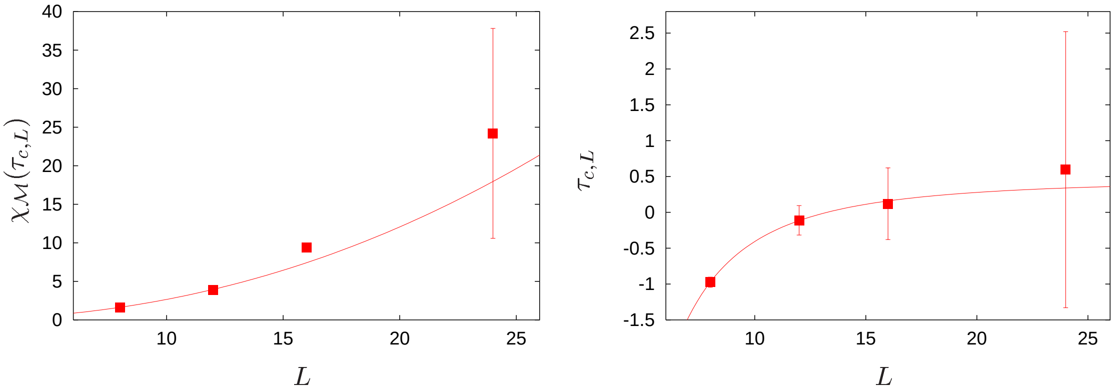


Abbildung 5.7: *Suszeptibilität des magnetisierungsartigen Operators als Funktion der temperaturartigen Skalenvariable.*

$$\frac{\gamma}{\nu} = 2.18(12) \qquad \text{und} \qquad \frac{1}{\nu} = 2.25(77). \tag{5.27}$$



(a) (b)

Abbildung 5.8: (a) *Skalenverhalten der Suszeptibilität des magnetisierungsartigen Operators.* (b) *Skalenverhalten der temperaturartigen Skalenvariable.*

Die kritischen Exponenten der Universalitätsklassen $3d$-Ising, $3d$-$O(2)$ und $3d$-$O(4)$ sind in der Tabelle 5.3(b) zu finden. Der kritische Exponent γ/ν hat in der angegebenen Genauigkeit für diese Universalitätsklassen den gleichen Wert von $\gamma/\nu \approx 1.96$. Dieser Wert liegt gerade ausserhalb des Vertrauens-Intervalls von (5.27), ist aber angesichts der großen Fehler nicht ausgeschlossen. Der hier erhaltene kritische Exponent $1/\nu$ ist nur sehr ungenau bestimmt und ist innerhalb der Fehler verträglich mit der 3d-Ising- und der $3d$-$O(2)$-Universalitätsklasse. Dennoch liegt der Wert des 3d-Ising Models am nächsten.

Zur Festlegung der Koordinaten τ und ξ wurde die oben bestimmte Position (5.12) des kritischen Punktes verwendet. Der Ursprung der neuen Koordinaten τ und ξ befindet sich dort. Bei der Bestimmung des kritischen Exponenten $1/\nu$ wurde die kritische Kopplung $\tau_{c,\infty}$ mitbestimmt. Daher ergab sich eine weitere, jedoch nicht so genaue Schätzung für

L	$\tau_{c,L}$	$\chi_{\mathcal{M}}(\tau_{c,L})$
8	-0.97(7)	1.64(2)
12	-0.11(21)	3.88(6)
16	0.12(50)	9.41(54)
24	0.6 ± 1.9	24.2 ± 13.6

(a)

Exponent	$3d$-Ising	$3d$-$O(2)$	$3d$-$O(4)$
$1/\nu$	1.59	1.49	1.34
β/ν	0.52	0.52	0.52
γ/ν	1.96	1.96	1.97

(b)

Tabelle 5.3: (a) *Die pseudokrititsche Skalenvariable $\tau_{c,L}$ und die Suszeptibilität $\chi_{\mathcal{M}}(\tau_{c,L})$ des magnetisierungsartigen Operators für verschiedene Gittergrößen.* (b) *Kritische Exponenten der Universalitätsklassen. Siehe auch Tabelle A.1.*

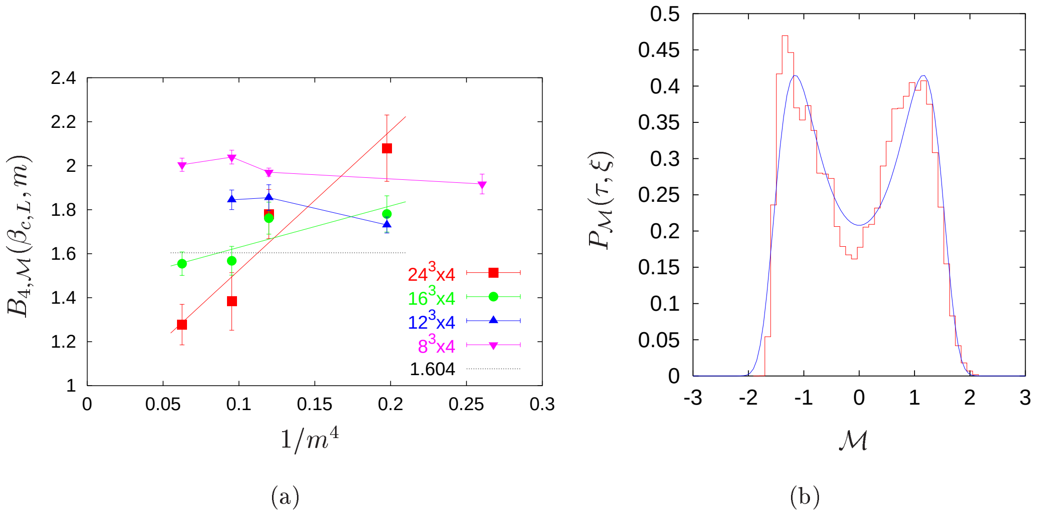


Abbildung 5.9: (a) *Die vierte Kumulante der Verteilung des magnetisierungsartigen Operators als Funktion der inversen Quarkmasse*, (b) *Verteilung des magnetisierungsartigen Skalenoperators am Punkt ($\beta = 5.6774$, $m = 1.8$). Die durchgezogene blaue Linie ist ein Fit mit dem Ansatz der Ising-Magnetisierung.*

den kritischen Punkt:

$$(\tau_c = 0.46(27), \xi_c = 0) \quad \longleftrightarrow \quad (\beta_c = 5.6802(28), m_c = 1.99(21)). \tag{5.28}$$

Die Einheiten auf der τ-Achse sind durch die Annahme einer Drehung so gewählt, daß τ mit zunehmender physikalischer Temperatur T wächst. In einem Spin-Modell würde τ jedoch einer inversen Temperatur entsprechen, da sich das System für große τ in der geordnete Phase befindet.

Analyse der Kumulante $B_{4,\mathcal{M}}$

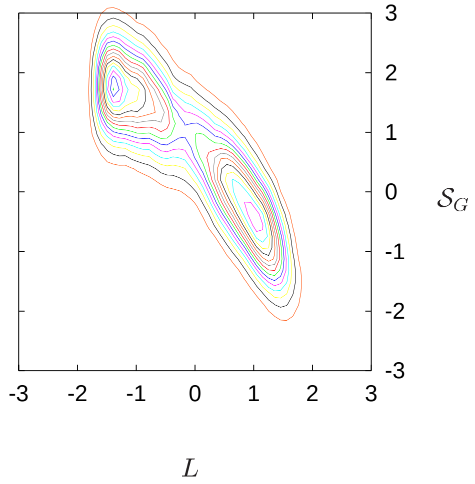
Der Schnittpunkt der Kumulante $B_{4,\mathcal{M}}$ hat einen universellen Wert, der charakteristisch für die Universalitätsklasse ist. In der Abbildung 5.9(a) ist die Kumulante gegen $1/m^4$ aufgetragen, wobei die Erwartungswerte jeweils auf der pseudokritischen Kopplung ausgewerte wurden. Der Mischungsparameter wurde dabei wieder $s = 0.223$ gesetzt. Wie man sieht, unterscheidet sich Abbildug 5.9(a) nicht wesentlich von der entsprechende Abbildung 5.4 der Kumulante des Polyakov-Loops (s=0). Die beiden kleinsten Gitter weisen aufgrund von großen Finite-Size-Effekten immer noch zu große Werte der Kumulante auf. Die Kumulanten der beiden größten Gitter sind mit einer Geraden approximiert worden. Daraus ergab sich ein Schittpunkt von $B_{4,c} = 1.67(13)$. Dieser Wert entspricht der Universalitätsklasse des $3d$-Ising-Modells von $B_{4,c} = 1.604(1)$ [32]. Die entsprechenden Werte der anderen Universalitätskassen sind 1.233(6) für $3d$-$O(2)$ [33] und 1.092(3) für $3d$-$O(4)$ [34].

Analyse der $\mathcal{M}$- und $\mathcal{EM}$-Verteilungen

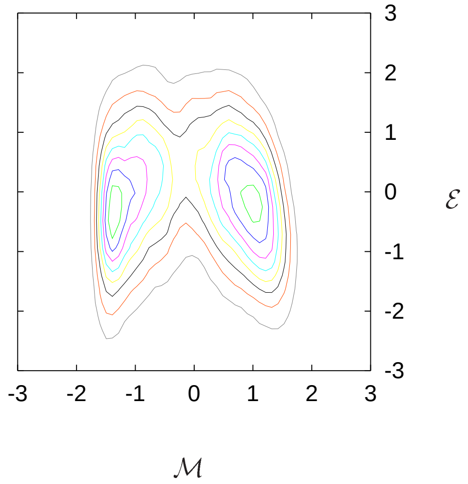
Ein weiterer starker Anhaltspunkt für die $3d$-Ising-Universalitätsklasse sind die Verteilungen der Skalenoperatoren, die am kritischen Punkt mit wachsender Systemgröße gegen eine universelle Verteilung streben. Die Abbildung 5.9(b) zeigt die Verteilung des magnetisierungsartigen Skalenoperators $\mathcal{M}$ (s=0.223) am Punkt ($\beta = 5.6774$, $m = 1.8$) auf einem $24^3 \times 4$ Gitter. Diese Verteilung wurde mit dem Ansatz (1.64) gefittet, was die Parameter

$$a = 0.21(21) \qquad \text{und} \qquad b = 0.69(11) \tag{5.29}$$

lieferte. Der Parameter a hat große Fehler, doch beide Parameter sind innerhalb der Fehler mit den Ising-Werten (1.65) verträglich. Das Minimum ist etwas zu stark ausgeprägt, was an einer zu geringen Statistik aber vor allem an der Masse $m > m_c$ liegt. In der Abbildung 5.10 sind die zugehörigen gemeinsamen Verteilungen dargestellt. Abbildung 5.10(a) zeigt die gemeinsame Verteilung des Polyakov-Loops und der gluonischen Wirkung, während die Abbildung 5.10(b) die aus einer Drehung und Umnormierung entstandene gemeinsame Verteilung der Skalenoperatoren $\mathcal{E}$ und $\mathcal{M}$ zeigt. Vergleicht man diese Verteilung mit den Verteilungen der Abbildung A.1, so ist die Übereinstimmung mit der universellen Verteilung des Ising-Modells am größten.

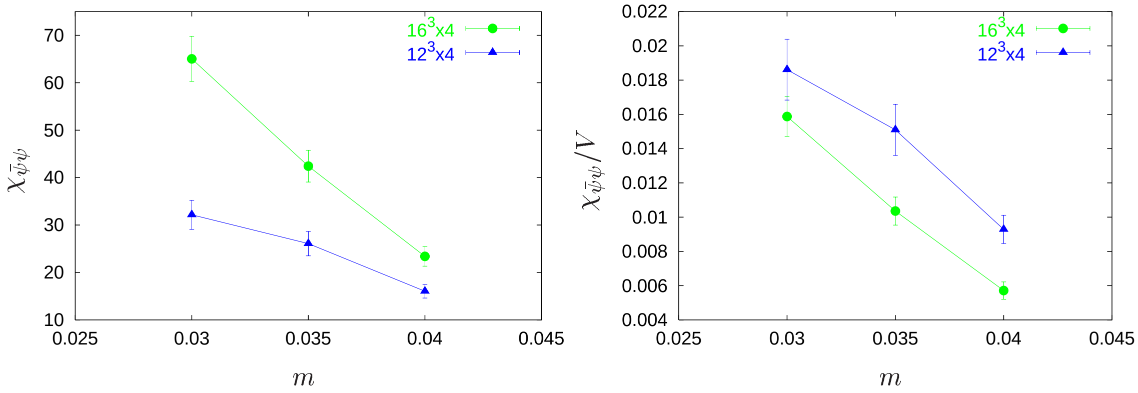


(a)



(b)

Abbildung 5.10: (a) *Gemeinsame Verteilung von Ployakov-Loop und gluonischer Wirkung.* (b) *Gemeinsame Verteilung der Skalenoperatoren. Die Verteilungen am Punkt ($\beta = 5.6774$, $m = 1.8$) sind geglättet und auf eine Varianz von eins normiert. Höhenlienen sind im Abstand von 0.02 eingezeichnet.*



(a) (b)

Abbildung 5.11: (a) *Suszeptibilität des chiralen Kondensats als Funktion der Quarkmasse,* (b)*Suszeptibilität des chiralen Kondensats pro Volumen als Funktion der Quarkmasse.*

5.2 3-Flavour-QCD bei leichten Quarkmassen

Die Untersuchung des kritischen Verhaltens der 3-Flavour-QCD läuft im Wesentlichen analog zu dem Fall $N_f = 2$. Da aus Gründen der Rechenzeit nur die beiden Gitter $12^3 \times 4$ und $16^3 \times 4$ bei den drei Masse $m = 0.03$, $m = 0.035$ und $m = 0.04$ untersucht werden konnten, wurde auf die wenig erfolgversprechende Analyse der Oberflächenspannung sowie der kritischen Exponenten verzichtet. Ferner wurde hier im Fall leichter Quarkmassen für den magnetisierungsartigen Skalenoperator der Ansatz einer Mischung aus gluonischer Wirkung und chiralem Kondensat gemacht. Da das chirale Kondensat der Ordnungsparameter im chiralen Limes $m \to 0$ ist, ist anzunehmen, daß auch der Ordnungsparameter des hier untersuchten kritischen Punktes noch einen großen Anteil des chiralen Kondensates enthält. Das chirale Kondensat geht proportional zur Masse in die Wirkung ein. Daher wurden die neuen Skalenvariablen als eine Mischung aus Kopplung und Masse angesetzt.

5.2.1 Bestimmung des kritischen Punktes

Analyse der Suszeptibilität des chiralen Kondensates

In den Abbildungen 5.11(a) und 5.11(b) ist die Suszeptibilität $\chi_{\bar{\psi}\psi}(\beta_{c,L})$ bzw. die Suszeptibilität pro Volumen $\chi_{\bar{\psi}\psi}(\beta_{c,L})/V$ gegen die Quarkmasse m aufgetragen. Bezüglich des erwarteten Skalenverhaltens gilt das gleiche wie in den Abbildungen 5.1(a) und 5.1(b) der Polyakov-Loop-Suszeptibilität. Wie man sieht, skaliert die Suszeptibilität bei der Masse $m = 0.03$ noch näherungsweise mit dem Volumen, während bei der Masse $m = 0.04$ schon fast keine Volumenabhänigkeit mehr zu sehen ist. Aus der Suszeptibilität kann daher eine kritische Masse von $m_c = 0.035(5)$ bestimmt werden.

Analyse der Kumulante $B_{4,\bar{\psi}\psi}$

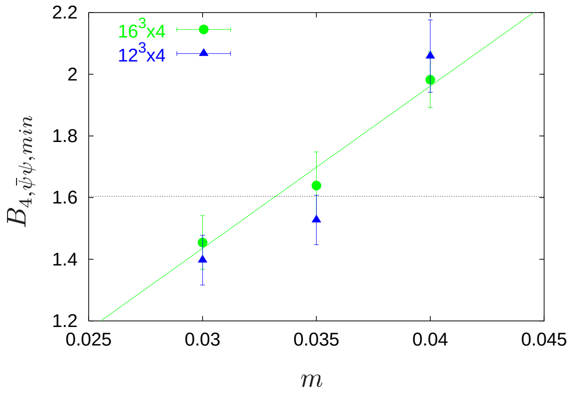


Abbildung 5.12: *Die Kumulante $B_{4,\bar{\psi}\psi}$ als Funktion der Quarkmasse*

Einen weiteren Hinweis auf die kritische Masse gibt die vierte Kumulante der Verteilung des chiralen Kondensats

$$B_{4,\bar{\psi}\psi}(\beta, m) = \frac{\langle(\delta\ \bar{\psi}\psi)^4\rangle}{\langle(\delta\ \bar{\psi}\psi)^2\rangle^2} \tag{5.30}$$

mit

$$\delta\ \bar{\psi}\psi \equiv \bar{\psi}\psi - \langle\bar{\psi}\psi\rangle\,. \tag{5.31}$$

In der Abbildung 5.12 ist diese Kumulante gegen die Quarkmasse m aufgetragen. Die Erwartungswerte sind dabei jeweils auf der pseudokritischen Kopplung $\beta_{c,L}(m)$ berechnet worden. An die Daten des $16^3 \times 4$ Gitters wurde eine Gerade gefittet. Die Daten des $12^3 \times 4$ Gitters besitzen dafür eine noch zu geringe Statistik. Durch die Annahme, daß sich das System in der Universalitätsklasse des $3d$-Ising-Modells befindet und daß sich die Kumulante des chiralen Kondensats nur wenig von der Kumulante des Ordnungsparameters unterscheidet, sowie dies im Fall schwerer Quarkmassen war, konnte eine weitere Schätzung der kritischen Masse ermittelt werden. Der Schnittpunkt dieser Geraden mit dem universellen Wert des Ising-Modells von 1.604 lieferte die Näherung

$$m_c = 0.033(7). \tag{5.32}$$

Diese kritische Masse steht im Einklang mit einem früheren Ergebnis von $m_c = 0.034$ aus Ref. [35].

Analyse der pseudokritischen Kopplungen

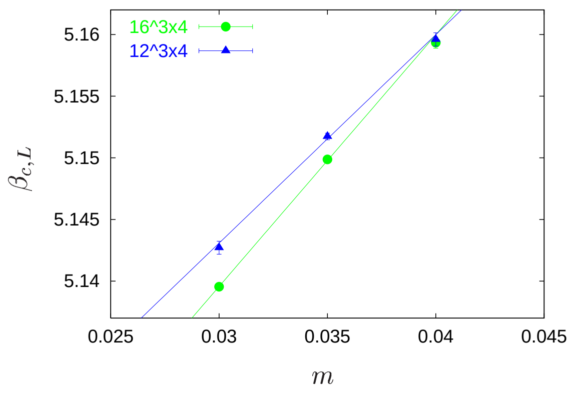


Abbildung 5.13: *Die pseudokritischen Kopplungen als Funktion der Quarkmasse*

In der Abbildung 5.13 sind die pseudokritischen Kopplungen $\beta_{c,L}$ gegen die Masse m aufgetragen und mit einer Gerade

$$\beta_{c,L}(m) = a_{c,L}m + b_{c,L} \tag{5.33}$$

gefittet worden. Für die Parameter erhält man die Ergebnisse

$$\begin{aligned} a_{c,16} &= 2.04(4), \\ b_{c,16} &= 5.0783(13) \end{aligned} \tag{5.34}$$

und

$$\begin{aligned} a_{c,12} &= 1.69(9), \\ b_{c,12} &= 5.092(3). \end{aligned} \tag{5.35}$$

Nimmt man an, daß die pseudokritischen Kopplungen $\beta_{c,L}(m_c)$ mit den Ising-Exponenten skalieren, so ergibt sich eine Schätzung für den kritischen Punkt von

$$(\beta_c = 5.1420(32), m_c = 0.033(7)). \tag{5.36}$$

5.2.2 Bestimmung der Skalenoperatoren und Skalenvariablen

Für die Skalenoperatoren und Skalenvariablen sind hier die Ansätze

$$\begin{array}{rclcrcl} \mathcal{E} & = & \mathcal{S}_G + r\bar{\psi}\psi & \qquad & \tau & = & \beta + Am \\ \mathcal{M} & = & \bar{\psi}\psi + s\mathcal{S}_G & & \xi & = & m + B\beta \end{array} \tag{5.37}$$

gemacht worden. Der Mischungsparameter B kann wieder aus der Steigung der Koexistenzlinie am krititschen Punkt bestimmt werden. Für das $16^3 \times 4$ Gitter ergab sich so ein Mischungsparameter von

$$B_{16} = -1/a_{c,16} = -0.49(1), \tag{5.38}$$

wobei $a_{c,L}$ der Fitparameter der pseudokritischen Kopplungen (5.33) ist. Entsprechend den Gleichungen (5.22) und (5.25) ergeben sich in diesem Fall die Beziehungen

$$\begin{aligned} s &= -\frac{\left\langle \delta(\bar{\psi}\psi)\delta\mathcal{S}_G\right\rangle - B\left\langle(\delta\ \bar{\psi}\psi)^2\right\rangle}{\langle(\delta\mathcal{S}_G)^2\rangle - B\left\langle\delta\mathcal{S}_G\delta(\bar{\psi}\psi)\right\rangle}, \\ r &= -B. \end{aligned} \tag{5.39}$$

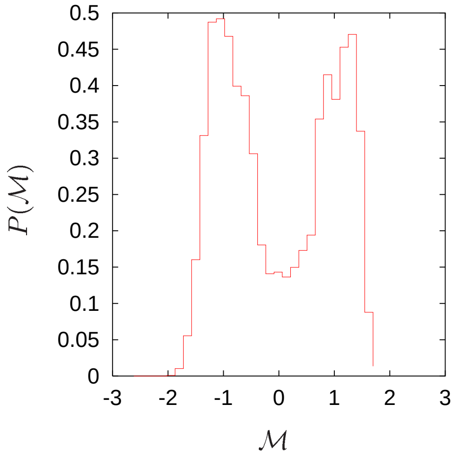
Auf diese Weise ergaben sich für die Mischungsparameter des $16^3 \times 4$ Gitters bei der Masse $m = 0.035$ die Werte

$$r_{16} = 0.49(1), \qquad s_{16} = 1.25(35). \tag{5.40}$$

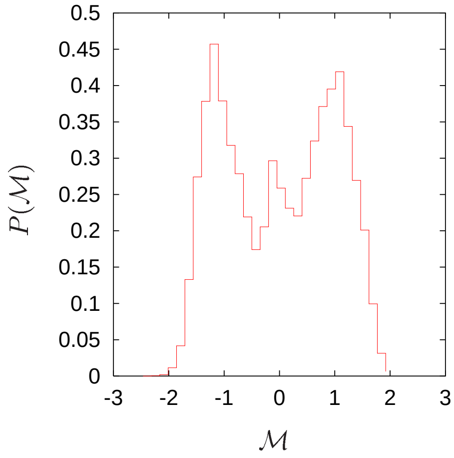
Wie schon bei den schweren Quarkmassen ist der Mischungsparameter s nur sehr ungenau bestimmt.

5.2.3 Bestimmung der Universalitätsklasse

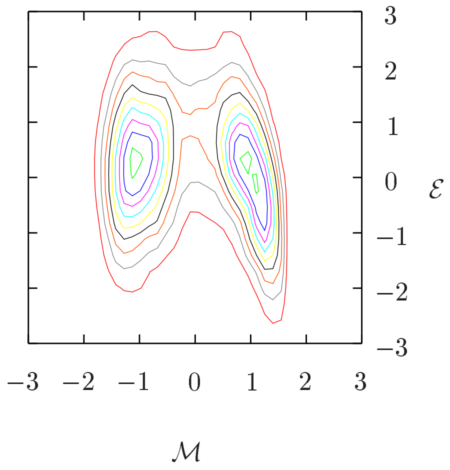
Die einzige Methode zur Bestimmung der Univeralitätsklasse, die hier auf Grund der geringen Statistik brauchbare Ergebnisse lieferte, war die Analyse der Verteilung der Skalenoperatoren. In der Abbildung 5.14 sind die Verteilung des magnetisierungsartigen Skalenoperators $\mathcal{M}$ sowie die gemeinsame Verteilung der Skalenoperatoren ($\mathcal{EM}$-Verteilung) dargestellt. Diese Histogramme sind auf dem $16^3 \times 4$ Gitter entstanden mit den Massen $m = 0.030$ und $m = 0.035$ und den jeweiligen pseudokritischen Kopplungen $\beta_{c,L}(m)$. Der Mischungsparameter r ist dabei so justiert worden, daß maximale Symmetrie vorlag. Dies war bei $r = 0.55$ der Fall, also leicht höher als der oben bestimmte Wert von $r = 0.49$. Ferner wurde festgestellt, daß die Histogramme relativ unempfindlich gegenüber der Wahl des Mischungsparameter s sind. Bei $m = 0.03$ wurde $s = -2$ und bei $m = 0.035$ wurde $s = 0$ gewählt. Alle Histogramme sind der universellen Verteilung der Skalenoperatoren des $3d$-Ising-Modells am ähnlichsten.



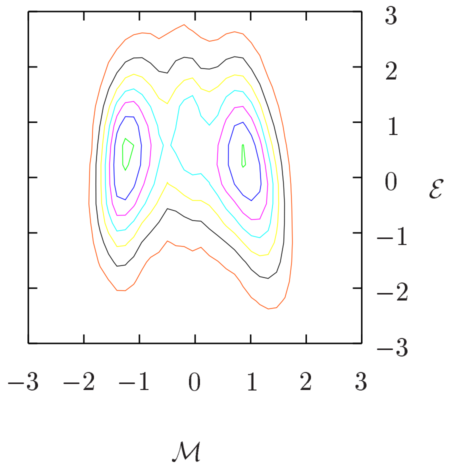
(a) $m = 0.030$



(b) $m = 0.035$



(c) $m = 0.030$



(d) $m = 0.035$

Abbildung 5.14: *Histogramme des Skalenoperators $\mathcal{M}$ und geglättete gemeinsame Histogramme der Skalenoperatoren $\mathcal{E}$ und $\mathcal{M}$. Diese Verteilungen wurden auf dem $16^3 \times 4$ Gitter mit den jeweiligen pseudokritischen Kopplungen $\beta_{c,L}(m)$ erzielt.*

Kapitel 6

Zusammenfassung

Es konnte gezeigt werden, daß die QCD mit zwei Flavour-Freiheitsgraden und Massenentartung in der Standard-Staggered-Fermion-Formulierung bei einer Kopplung von $\beta_c = 5.6756(5)$ und einer nackten Quarkmasse von $m_c = 1.738(35)$ (in Gittereinheiten) einen kritischen Punkt aufweist. Das entspricht einer kritischen Pionmasse von $(m_\pi/\sqrt{\sigma})_c = 5.96(11)$. Ferner wurden durch Mischen der gluonischen Standard-Wilson-Wirkung und des Polyakov-Loops zwei neue Operatoren konstruiert, die als Approximation für die Skalenoperatoren dienten. Die Skalenoperatoren lieferten mehrere Anhaltspunkt dafür, daß das kritische Verhalten des Systems in der Nähe dieses kritischen Punktes durch die Exponenten des $3d$-Ising-Modells beschrieben werden kann. Die Anhaltspunkte sind nicht nur die kritischen Exponenten selber, die auf $\gamma/\nu = 2.18(12)$ und $1/\nu = 2.25(77)$ bestimmt werden konnten, sondern vor allem der Schnittpunkt der vierten Kumulante der Verteilung des magnetisierungsartigen Skalenoperators bei $B_{4,\mathcal{M},c} = 1.67(13)$, sowie die Verteilung der Skalenoperatoren ansich. Die gemeinsame Verteilung der energie- und magnetisierungsartigen Skalenoperatoren weisen die typische Bumerang-Form der Ising-Verteilung auf. Um sichere Aussagen treffen zu können müssen jedoch noch mehr Simulationen in der Nähe des kritischen Punktes mit höherer Statistik durchgeführt werden.

Im Fall der 3-Flavour-QCD konnte der kritische Punkt bei $\beta_c = 5.1420(32)$ und $m_c = 0.033(7)$ lokalisiert werden. Die kritische Masse stimmt mit den Ergebnissen aus Ref. [35] überein. Hier wurden die Skalenoperatoren durch eine Mischung aus gluonischer Wirkung und chiralem Kondensat konstruiert, deren Verteilung wiederum die typische $3d$-Ising Form aufweist.

Anhang A

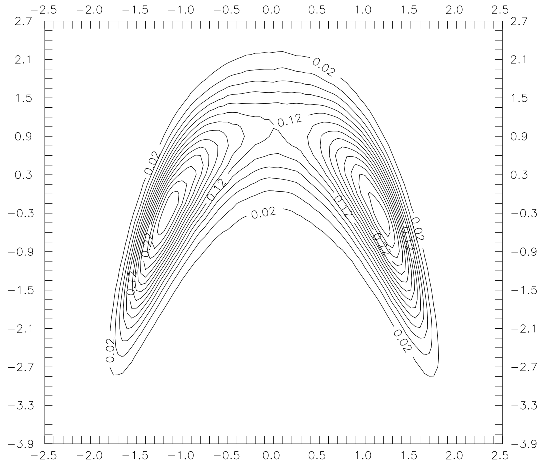
Universalitätsklassen

A.1 Kritische Exponenten

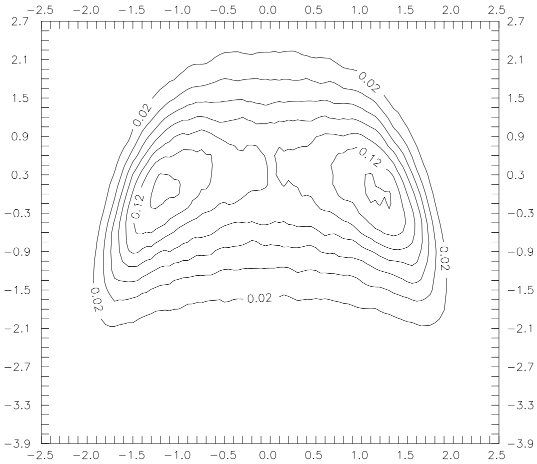
Exponent	$3d$-Ising-Modell	$3d$-$O(2)$-Modell	$3d$-$O(4)$-Modell
α		-0.0150(33)	-0.244(27)
β	0.3258(44)	0.3490(6)	0.3836(46)
γ	1.239(7)	1.3190(22)	1.477(18)
δ		4.7798(16)	4.851(22)
ν	0.6289(8)	0.6723(11)	0.7479(90)
η		0.0381(4)	
$1/\nu$	1.587(3)	1.4874(24)	1.337(16)
γ/ν	1.9630(30)	1.9619(49)	1.9746(38)

Tabelle A.1: *Kritische Exponenten verschiedener Modelle aus MC-Simulationen [36, 37, 34]. Die Exponenten die nicht direkt bestimmt werden konnten, wurden mit den Skalengesetzen berechnet.*

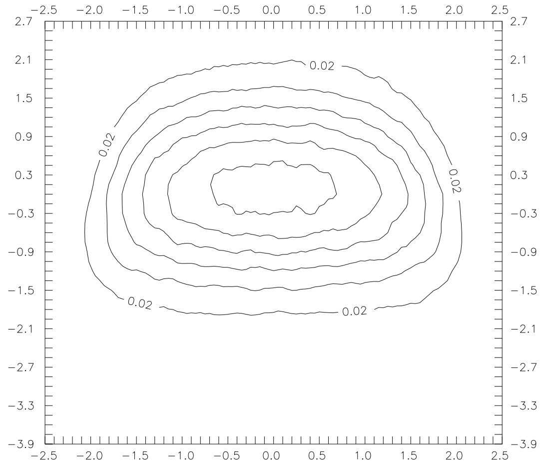
A.2 $\mathcal{EM}$-Verteilungen



(a) Ising



(b) $O(2)$



(c) $O(4)$

Abbildung A.1: *Geglättete und normalisierte Verteilungen der $\mathcal{E}$- und $\mathcal{M}$-artigen Observabeln für verschiedene Universalitätsklassen. Auf der vertikalen Achse ist $\mathcal{E}$, auf der horizontalen Achse ist $\mathcal{M}$ aufgetragen*

Anhang B

Technische Details

B.1 MD-Bewegungsgleichungen des Hybrid-R-Algorithmus

Die Integration der Bewegungsgleichungen im Hybrid-R-Algorithmus bedingt die Berechnung von den Zeitableitungen $\dot{H}_\mu(n)$ die implizit durch die Bedingung

$$0 = \dot{\mathcal{H}} = \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr}\, \dot{H}_\mu(n) H_\mu(n) + \frac{d}{dt} S_G - \frac{N_f}{4} \mathrm{Tr}\, P \frac{d}{dt} (K^\dagger[U] K[U]) \tag{B.1}$$

gegeben sind, mit $P = XX^*$, wie in (4.16) definiert. Für die Ableitung der Wilson-Wirkung S_G ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_G &= \frac{\beta}{6} \sum_{n,\mu,\nu} \frac{d}{dt} \mathrm{Tr} \left\{ U_{\mu,\nu}(n) + U^\dagger_{\mu,\nu}(n) \right\} \\ &= \frac{\beta}{6} \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr} \left\{ \dot{U}_\mu(n) V_\mu(n) + V^\dagger_\mu(n) \dot{U}^\dagger_\mu(n) \right\} \\ &= \frac{\beta}{6} \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr} \left\{ i H_\mu(n) U_\mu(n) V_\mu(n) + \mathrm{H.c.} \right\} \end{aligned} \tag{B.2}$$

mit

$$V_\mu(n) = \sum_{\nu \neq \mu} U_\nu(n+\hat{\mu}) U^\dagger_\mu(n+\hat{\nu}) U^\dagger_\nu(n). \tag{B.3}$$

Im letzten Schritt wurde die Bewegungsgleichung (4.13) eingesetzt. H.c. bezeichnet den hermitsch konjugierten Term. Für den pseudofermionischen Teil erhält man

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_{PF} &= \frac{N_f}{4} \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr} \left\{ P \left[K^\dagger \frac{\partial K}{U_\mu(n)} \dot{U}_\mu(n) + \frac{\partial K^\dagger}{U_\mu(n)} \dot{U}_\mu(n) K + \mathrm{H.c.} \right] \right\} \\ &= \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr} \left\{ P K^\dagger \frac{\partial K}{U_\mu(n)} i H_\mu(n) U_\mu(n) + P \frac{\partial K^\dagger}{U_\mu(n)} i H_\mu(n) U_\mu(n) K + \mathrm{H.c.} \right\} \end{aligned}$$

$$= \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr}\left\{ iH_\mu(n)U_\mu(n)PK^\dagger \frac{\partial K}{U_\mu(n)} + iH_\mu(n)U_\mu(n)KP\frac{\partial K^\dagger}{U_\mu(n)} + \mathrm{H.c.}\right\}. \quad (B.4)$$

Auch hier wurden die Zeitableitungen der Linkvariabeln wieder mit Hilfe von (4.13) eliminiert. Sowohl in (B.1) als auch in (B.4) kann man nun $iH_\mu(n)$ ausklammern und die Bedingung (B.1) läßt sich auf die Form

$$\dot{\mathcal{H}} = 0 = \sum_{n,\mu} \mathrm{Tr}\left\{ H_\mu(n)\left[\dot{H}_\mu(n) + iF_\mu(n)[U]\right]\right\} \quad (B.5)$$

bringen. Da $H_\mu(n)$ spurlos ist, ist die Bedingung (B.5) erfüllt, wenn die Größe in den eckigen Klammern ein Vielfaches der Einheitsmatrix ist. Die Bedingung $\mathrm{Tr}\,(\dot{H}_\mu(n)) = 0$ bestimmt die übrige Konstante. Da die Pseudofermionfelder nur auf geraden Gitterplätzen definiert sind ist $P(i,j)$ nur für gerade i,j von Null verschieden. Für $\dot{H}_\mu(n)$ ergibt sich so eine unterschiedliche Form für gerade und ungerade n. Es gilt

$$\begin{aligned} i\dot{H}_\mu(n) = \Bigg[&\frac{\beta}{3}U_\mu(n)V_\mu(n) \\ &-2U_\mu(n)\Bigg(\sum_\nu U_\nu(n+\hat\mu)P(n+\hat\mu+\hat\nu,n) \\ &\qquad -\sum_{\nu\neq\mu} U_\nu^\dagger(n+\hat\mu-\hat\nu)P(n+\hat\mu+\hat\nu,n)\Bigg)\Bigg]_{\mathrm{TA}} \end{aligned} \quad (B.6)$$

für gerade n und

$$\begin{aligned} i\dot{H}_\mu(n) = \Bigg[&\frac{\beta}{3}U_\mu(n)V_\mu(n) \\ &-2U_\mu(n)\Bigg(\sum_\nu P(n+\hat\mu,n-\hat\nu)U_\nu(n-\hat\nu) \\ &\qquad -\sum \nu\neq\mu P(n+\hat\mu,n+\hat\nu)U_\nu^\dagger(n)\Bigg)\Bigg]_{\mathrm{TA}} \end{aligned} \quad (B.7)$$

für ungerade n. Dabei bezeichnet TA den spurlosen anti-hermitschen Teil der Matrix

$$A_{\mathrm{TA}} = \frac{1}{2}(A - A^\dagger) - \frac{1}{6}\mathrm{Tr}\,(A - A^\dagger). \quad (B.8)$$

In (B.6) und (B.7) sind die staggered Phasen $\eta_\mu(n)$ in den Linkvariabeln absorbiert. In Zeit-Richtung diskretisiert werden die Bewegungsgleichungen auf folgende Weise:

$$H_\mu(n)\left[\mathrm{t} + \frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right] - H_\mu(n)\left[\mathrm{t} - \frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right] = \dot{H}_\mu(n)[\ \mathrm{t}\ ]\delta\mathrm{t} + \mathcal{O}(\delta\mathrm{t}^3) \quad (B.9)$$

und

$$U_\mu(n)\,[\mathrm{t}+\delta\mathrm{t}] = \exp\left\{ iH_\mu\left[\mathrm{t}+\frac{1}{2}\delta\mathrm{t}\right]\delta\mathrm{t}\right\} U_\mu(n)[\ \mathrm{t}\ ] + \mathcal{O}(\delta\mathrm{t}^3). \quad (B.10)$$

Anhang C

Tabellen

C.1 2-Flavour-QCD bei schweren Quarkmassen

	$8^3 \times 4$			$12^3 \times 4$		
m	$\beta_{c,8}(m)$	$\chi_{c,8}(m)$	$B_{4,c,8}(m)$	$\beta_{c,12}(m)$	$\chi_{c,12}(m)$	$B_{4,c,12}(m)$
1.0				5.6475(19)	3.32(20)	1.904(81)
1.2				5.6572(7)	3.45(14)	1.812(44)
1.3				5.6622(8)	3.19(18)	1.890(81)
1.5				5.6725(7)	3.75(18)	1.796(50)
1.7	5.6823(14)	1.400(16)	1.950(17)	5.6766(13)	3.53(16)	1.838(53)
1.8	5.6830(10)	1.325(25)	2.029(29)	5.6820(15)	3.69(19)	1.828(51)
2.0	5.6820(13)	1.336(26)	1.988(27)			
	$16^3 \times 4$			$24^3 \times 4$		
m	$\beta_{c,16}(m)$	$\chi_{c,16}(m)$	$B_{4,c,16}(m)$	$\beta_{c,24}(m)$	$\chi_{c,24}(m)$	$B_{4,c,24}(m)$
1.1	5.6523(6)	5.57(14)	1.910(58)			
1.2	5.6558(8)	5.66(19)	1.895(45)			
1.3	5.6616(7)	6.34(38)	1.801(82)	5.6602(6)	7.96(1.01)	2.45(10)
1.4	5.6663(5)	6.56(23)	1.818(49)	5.6645(5)	12.62(1.30)	1.88(11)
1.5	5.6720(7)	6.75(55)	1.756(76)	5.6677(4)	12.56(1.17)	2.06(15)
1.7	5.6778(5)	7.29(34)	1.755(66)	5.6751(3)	15.66(1.33)	1.79(12)
1.8	5.6774(3)	8.31(41)	1.572(56)	5.6778(4)	23.08(2.10)	1.43(10)
2.0	5.6821(9)	8.19(39)	1.531(46)	5.6809(3)	25.70(1.15)	1.28(5)

Tabelle C.1: *Die pseudokritische Kopplung, sowie die Suszeptibilität des Polyakov-Loops und die vierte Kumulante der Polyakov-Loop-Verteilung an der pseudokritischen Kopplung, für verschiedene Massen und Gittergrößen.*

C.2 3-Flavour-QCD bei leichten Quarkmassen

	$12^3 \times 4$			$16^3 \times 4$		
m	$\beta_{c,12}(m)$	$\chi_{c,12}(m)$	$B_{4,c,12}(m)$	$\beta_{c,16}(m)$	$\chi_{c,16}(m)$	$B_{4,c,16}(m)$
0.030	5.1406(6)	40.8(2.6)	1.51(9)	5.1396(1)	86.7(6.3)	1.45(9)
0.035	5.1506(6)	31.6(2.0)	1.58(6)	5.1499(1)	56.6(4.5)	1.64(11)
0.040	5.1595(4)	21.9(1.3)	1.91(7)	5.1593(5)	31.2(2.8)	1.98(9)

Tabelle C.2: *Die pseudokritische Kopplung, sowie die Suszeptibilität des chiralen Kondensats und die vierte Kumulante der Verteilung des chiralen Kondensats an der pseudokritischen Kopplung, für verschiedene Massen und Gittergrößen.*

Literaturverzeichnis

[1] CERN, *A new state of matter.* http://cern.web.cern.ch/CERN/Announcements/2000/NewStateMatter/, 2000.

[2] R. B. Griffiths, “Dependence of critical indices on a parameter”, *Phys. Rev. Lett.* **24** (1970) 1949.

[3] L. P. Kadanoff *Physics* **2** (1966) 263.

[4] K. G. Wilson *Phys. Rev.* **B4** (1971) 3998.

[5] A. Berker and M. Fisher, “Scaling of first - order phase transitions in thermodynamic and finite systems”, *Phys. Rev.* **B26** (1982) 2507.

[6] A. D. Bruce and N. Wilding, “Density fluctuations and field mixing in the critical fluid”, *J. Phys.: Condes. Matter* **4** (1992) 3087.

[7] K. Binder, “Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions”, *Z. Phys. B - Condensed Matter* **43** (1981) 119.

[8] A. D. Bruce, “Probability density functions for collective coordinates in Ising-like systems”, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14** (1981) 3667.

[9] H. W. J. Blöte, J. R. Heringa, and M. M. Tsypin, “Three-dimensional Ising model in the fixed-magnetization ensemble: a Monte Carlo study”, *Phys. Rev.* **E62** (2000) 77, `cond-mat/9910145`.

[10] K. Binder, “Monte Carlo calculation of the surface tension for two- and three-dimensional lattice-gas models”, *Phys. Rev.* **A25** (1982) 1699.

[11] F. Wilczek, “QCD in extreme conditions”, `hep-ph/0003183`.

[12] B. Svetitsky and L. G. Yaffe, “Critical behavior at finite temperature confinement transitions”, *Nucl. Phys.* **B210** (1982) 423.

[13] L. G. Yaffe and B. Svetitsky, “First order phase transition in the $SU(3)$ gauge theory at finite temperature”, *Phys. Rev.* **D26** (1982) 963.

[14] R. D. Pisarski and F. Wilczek, “Remarks on the chiral phase transition in chromodynamics”, *Phys. Rev.* **D29** (1984) 338.

[15] S. Gavin, A. Gocksch, and R. D. Pisarski, "QCD and the chiral critical point", *Phys. Rev.* **D49** (1994) 3079, `hep-ph/9311350`.

[16] K. Wilson, "Confinement of quarks", *Phys. Rev.* **D10** (1974) 2445.

[17] J. Kogut and L. Susskind, "Hamiltonian formulation of Wilson's lattice gauge theories", *Phys. Rev.* **D11** (1975) 395.

[18] T. Banks, L. Susskind, and J. Kogut, "Strong coupling calculations of lattice gauge theories: (1+1)-dimensional exercises", *Phys. Rev.* **D13** (1976) 1043.

[19] F. Karsch, *Simulationsverfahren.* http://www.physik.uni-bielefeld.de/~karsch/simulationsverfahren.ps, 1999.

[20] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C.* Cambridge University Press, 2nd ed., 1992.

[21] S. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R. L. Renken, and R. L. Sugar, "Hybrid molecular dynamics algorithms for the numerical simulation of quantum chromodynamics", *Phys. Rev.* **D35** (1987) 2531.

[22] **JLQCD** Collaboration (S. Aoki *et al.*), "Scaling study of the two-flavor chiral phase transition with the Kogut-Susskind quark action in lattice QCD", *Phys. Rev.* **D57** (1998) 3910, `hep-lat/9710048`.

[23] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, "New M0nte Carlo technique for studying phase transitions", *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2635.

[24] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, "Optimized Monte Carlo analysis", *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989) 1195.

[25] Y. Iwasaki *et al.*, "Finite temperature phase transition of $SU(3)$ gauge theory on $n_t = 4$ and 6 lattices", *Phys. Rev.* **D46** (1992) 4657.

[26] B. Beinlich, F. Karsch, and A. Peikert, "$SU(3)$ latent heat and surface tension from tree level and tadpole improved actions", *Phys. Lett.* **B390** (1997) 268, `hep-lat/9608141`.

[27] M. Lütgemeier, *Phasenübergänge in der QCD mit fundamentalen und adjungierten Quarks.* Dissertation an der Universität Bielefeld, 1998.

[28] B. Beinlich, F. Karsch, E. Laermann, and A. Peikert, "String tension and thermodynamics with tree level and tadpole improved actions", *Eur. Phys. J.* **C6** (1999) 133, `hep-lat/9707023`.

[29] J. J. Rehr and N. D. Mermin, "Revised scaling equation of state at the liquid-vapor critical point", *Phys. Rev.* **A8** (1973) 472.

[30] N. B. Wilding, "Simulation studies of fluid critical behavior", *J. Phys.: Condens. Matter* **9** (1997) 585.

[31] F. Karsch and S. Stickan, “The three-dimensional, three-state Potts model in an external field”, *Phys. Lett.* **B488** (2000) 319, `hep-lat/0007019`.

[32] H. W. J. Blöte, E.Luijten, and J. R. Heringa, “Ising universality in three dimensions: A Monte Carlo study”, *J.Phys. A: Math. Gen.* **28** (1995) 6289, `cond-mat/9509016`.

[33] A. P. Gottlob and M. Hasenbusch, “Critical behavior of the 3-d XY model: A Monte Carlo study”,. CERN-TH-6885-93.

[34] K. Kanaya and S. Kaya, “Critical exponents of a three dimensional $O(4)$ spin model”, *Phys. Rev.* **D51** (1995) 2404, `hep-lat/9409001`.

[35] **JLQCD** Collaboration (S. Aoki *et al.*), “Phase structure of lattice QCD at finite temperature for 2+1 flavors of Kogut-Susskind quarks”, *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* **73** (1999) 459, `hep-lat/9809102`.

[36] D. P. Landau *Physica* **A205** (1994) 41.

[37] M. Hasenbusch and T. Török, “High precision Monte Carlo study of the 3-d XY universality class”, `cond-mat/9904408`.

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter der Anleitung von Herrn Prof. Dr. Frithjof Karsch angefertigt. Bei ihm möchte ich mich hiermit für die hervorragende Betreuung bedanken. Einen besonderen Dank möchte ich auch Andreas Peikert und Sven Stickan aussprechen, die für Fragen und Diskussionen stets offen waren. Desweiteren danke ich Ines Wetzorke und Olaf Kaczmarek mit deren Hilfe alle technischen Probleme schnell beseitigt wurden. Ein Dank geht auch an Sven Holtmann für seine Hilfe bei der Fehlersuche. Allen anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe möchte ich für das angenehme Arbeitsklima danken, das erheblich zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat.

Ein ganz herzlicher Dank gilt meinen Eltern, die mir das Studium der Physik ermöglicht haben, sowie meiner Freundin Wibke für ihre Geduld und Nachsicht.

Erklärung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit mit keinen weiteren, als im Literaturverzeichnis angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Christian Schmidt