QCD
im Grenzfall hoher Temperaturen,
im statischen Limes
und kleiner, aber endlicher Baryonendichte

Diplomarbeit

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Olaf Leonhard

April 2002

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Numerische Simulationen der Elementarteilchenphysik im Bereich starker Wechselwirkungen durch Standard Monte Carlo Methoden beschränken sich in der Regel auf den Bereich verschwindender Baryonendichte. Im Falle der in der Realität vorhandenen endliche Quarkdichte jedoch entfallen a priori die Voraussetzungen für diesen wahrscheinlichkeitstheoretischen Zugang.

Bestimmte Grenzfälle sind durch eine Umformulierung des Monte Carlo Ansatzes dennoch numerisch zu erfassen. Hierdurch werden eventuell allerdings Auslöschungen aufgrund von Vorzeichenfluktuationen in den Observablen bedingt, die erhöhte Statistiken erzwingen bzw. den zu untersuchenden Bereich begrenzen.

In dieser Arbeit wird der Limes statischer Quarks, unendlich hoher Temperaturen und kleiner, aber endlicher Baryondichte, sowohl im häufiger verwendeten großkanonischen wie auch im kanonischen Ansatz in einer auch für die Quantenchromodynamik (QCD) mit unendlich schweren Quarks analog und im Vergleich hierzu benutzten Formulierung diskutiert, insbesondere mit Blick auf das Vorzeichenproblem. Weiterhin wird die Existenz eines kritischen Endpunktes bei endlichem Quarkzahl-Volumenverhältnis untersucht.

Diese Arbeit ist wie folgt aufgebaut: Nachdem zuerst in die Elementarteilchentheorie und den allgemeinen Formalismus der QCD eingeführt wurde, Kapitel 2, wird im nächsten Kapitel, die kanonische Beschreibung der QCD mit unendlichen schweren Quarks durch die Betrachtung unendlicher Temperatur und kleiner Dichten auf ein erweitertes dreidimensionales 3-Zustands Pottsmodell reduziert. Im Kapitel 4 werden die Simulations- und Analysemethoden beschrieben. In den folgenden beiden Kapiteln werden dann die Ergebnisse vorgestellt. Kapitel 7 faßt die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick für die Zukunft.

Kapitel 2

Quantenchromodynamik

In diesem Kapitel wird, nachdem zunächst in Abschnitt 2.1 ein Überblick über die zwischen den elementaren Teilchen wirkenden Kräften gegeben wurde, die Formulierung der QCD im Kontinuum, sowohl in der in diesem Fall üblicherweise benutzten Minkowski-Metrik wie auch im für die Gitterformulierung geeigneten euklidischen Raum, beschrieben, Abschnitt 2.2. Weiterhin wird der Übergang zur diskretisierten Beschreibung der QCD vorgestellt, Abschnitt 2.3.

2.1 Kräfte zwischen Elementarteilchen

In der modernen Elementarteilchenphysik beschreibt man die Vielzahl der heute bekannten Teilchen durch wenige fundamentale Teilchen und ihre Wechselwirkungen.

Die grundlegenden Kräfte in der Natur sind die elektromagnetische, die schwache, die starke Kraft und die Gravitation. Die Lagrangedichten der ersten drei Kräfte lassen sich jeweils aus dem Prinzip lokaler Eichinvarianz herleiten. Bis jetzt entzieht sich die Gravitation einer vereinheitlichten Beschreibung, die anderen werden im sogenannten Standardmodell zusammengefaßt.

Die Teilchen werden eingeteilt in Fermionen mit halbzahligem und Bosonen mit ganzzahligem Spin.

Grundbausteine der Materie sind die zu den Fermionen gehörigen Quarks und Leptonen.

Quarks unterliegen der elektromagnetischen, schwachen und starken Wechselwirkung. Sie tragen elektrische Ladungen von -1/3, 2/3 und haben drei Farbfreiheitsgrade, tragen also auch Farbladung. Bisher wurden nur farbneu-

trale Bindungszustände, Hadronen, beobachtet, die aus Quark und Antiquark bestehenden Mesonen und die aus drei Quarks verschiedener Farbe bestehenden Baryonen. Quarks existieren in sechs verschieden Typen bzw. Flavourn, die sich in ihrer Masse unterscheiden: (u)p, (d)own, (s)trange, (c)harme, (b)ottom und (t)op.
Die Leptonen hingegen spüren nur die schwache und, falls sie geladen sind, auch die elektromagnetische Wechselwirkung.
In den quantisierten Theorien werden die Kräfte zwischen den Teilchen durch Eichbosonen übertragen, die mit den Generatoren der Eichgruppe verbunden sind.
Die Gravitation ist im Bereich atomarer Ausdehnungen völlig vernachlässigbar und muß daher in der Elementarteilchenphysik nicht berücksichtigt werden. Beispielsweise ist die Gravitationskraft zwischen Elektron und Proton in einem Wasserstoffatom rund 10^{39} schwächer als die elektromagnetische Kraft.
Die elektromagnetische Kraft wirkt über Photonen auf alle elektrisch geladenen Teilchen und wird durch die Quantenelektrodynamik (QED) beschrieben, die unter Transformationen mit der Eichgruppe U(1) eichinvariant ist. Sie domiert bei relativ großen Entfernungen, da das Potential einer Punktladung umgekehrt proportional mit der Entfernung fällt, also unendlich reichweitig ist.
Die schwache Wechselwirkung wird durch die elektrisch geladenen W^+- und W^-- Bosonen und das neutrale Z^0-Boson übertragen. In den sechziger Jahren gelang es Glashow, Salam und Weinberg, die Theorie der schwachen Kräfte mit der QED zu vereinheitlichen und durch die Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung zu beschreiben. Die Reichweite der schwachen Kraft liegt im Bereich von 10^{-18}m . Im Vergleich zu der starken Wechselwirkung ist sie um viele Größenordnungen schwächer. Zuerst wurde sie beim β-Zerfall beobachtet.
Die starke Kraft wird durch die Quantenchromodynamik beschrieben. Diese ist lokal invariant unter der Farbladungsgruppe SU(3). Die Wechselwirkung beschränkt sich auf Quarks und wird durch 8 Gluonen übertragen, die ebenfalls Farbladung tragen und daher auch miteinander selbstwechselwirken. Dies hat zur Folge, daß das Potential (bei nicht allzu hohen Temperaturen und bzw. oder Dichten) zwischen zwei Quarks bei kleiner werdenden Abständen coulombartig gegen Null geht und bei größer werdenden Abständen zuletzt linear ansteigt, eine Separation also eine unendliche Menge Energie kosten würde und somit das Auftreten von gebundenen Quarkzuständen erklärt. Dieses Verhalten wird als *asymptotische Freiheit* bzw. *Confinement* bezeichnet, zwei wesentliche Phänomene der QCD. Da die asymptotische Freiheit mit kleinen Kopplungen einhergeht, bietet sich

für diesen Bereich ein störungstheoretischer Zugang an. Will man aber das Confinement untersuchen, so muß man einen Weg wählen, der auch große Kopplungen erlaubt. Dies leistet die auf Wilson zurückgehende Gitterformulierung der QCD [1]. Hierzu ersetzt man in der euklidischen Formulierung der QCD die kontinuierliche Raumzeit durch ein diskretes Raumzeit-Gitter mit festem Gitterabstand, sodaß die im Kontinuum unendlichen Pfadintegrale nun hoch- aber endlichdimensional sind und durch Monte-Carlo Methoden numerisch berechnet werden können [2, 3, 4]. Die starke Wechselwirkung dominiert im Bereich nicht zu kleiner Abstände aufgrund der dort starken Kopplung.

2.2 QCD im Kontinuum

Im Standardmodell wird die starke Wechselwirkung von Quarks und Gluonen von einer relativistischen Quantenfeldtheorie beschrieben, von der lokale Eichinvarianz unter der Farbladungsgruppe SU(3) gefordert wird. Aus der Existenz des $\triangle^{++}$-Teilchens, das aus 3 up-Quarks besteht, ergibt sich zum Beispiel die Notwendigkeit, will man das Pauliprinzip nicht verletzen, einen weiteren inneren Freiheitsgrad der Quarks einzuführen. Dieser kann 3 verschiedene Werte annehmen, die man im allgemeinen mit den Farben blau, rot, grün identifiziert. Im Gegensatz zur QED ist die QCD nichtabelsch, sodaß die die Wechselwirkung vermittelnden Eichbosonen, die Gluonen, auch miteinander selbstwechselwirken und farbneutrale Zustände ausbilden können.

Um eine lokal eichinvariante Theorie zu bekommen, betrachtet man zunächst die Lagrangedichte für freie Quarks im Minkowskiraum

$$\mathcal{L}(x) = \sum_{a,f} \bar{\psi}^{a,\alpha,f}(x)(i\partial\!\!\!/ - m_f)_{\alpha\beta}\psi^{a,\beta,f}(x) \ . \tag{2.1}$$

Die Fermionfelder ψ (Antifermionfelder $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger\gamma_0$), die die Quarks beschreiben, tragen dabei den Farbindex $a = 1, 2, 3$, den Spinorindex $\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$ und den Flavourindex $f = 1, 2, ..., N_f$. Dabei gilt wie üblich $\partial\!\!\!/ = \partial^\mu\gamma_\mu$. Die γ_μ sind die Dirac-Matrizen, die den Antivertauschungsrelationen $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}$ genügen.

Die Lagrangedichte ist global eichinvariant unter den Transformationen

$$\begin{aligned} \psi^f(x) &\longrightarrow G\psi^f(x) \ , \qquad G \in SU(3) \\ \bar{\psi}^f(x) &\longrightarrow \bar{\psi}^f(x)G^{-1} \ . \end{aligned} \tag{2.2}$$

Dabei ist G unabhängig von x.

Um nun eine auch lokal eichinvariante Theorie zu erhalten, führt man entsprechend den acht Erzeugenden der SU(3), den sogenannten Gell-Mann Matrizen λ_k, acht reelle Eichfelder $A_\mu^k(x)$ ein, faßt diese zu einer 3×3 Matrix zusammen,

$$A_\mu(x) = \sum_k \frac{1}{2} A_\mu^k(x) \lambda_k \quad , \tag{2.3}$$

und ersetzt die Ableitung durch eine kovariante Ableitung nach dem Prinzip der *minimalen Substitution*.

$$\partial_\mu \longrightarrow D_\mu \equiv \partial_\mu + igA_\mu(x) \ . \tag{2.4}$$

Dabei ist g in Analogie zur Ladung e in der QED die Kopplungskonstante der starken Wechselwirkung und die $A_\mu(x)$ beschreiben die Gluonen, die Eichbosonen der QCD. Die Gluon- und Fermionfelder transformieren sich dann unter $G(x) \in$ SU(3) gemäß

$$\begin{array}{rcl} \psi(x) & \longrightarrow & G(x)\psi(x) \\ \bar{\psi}(x) & \longrightarrow & \bar{\psi}(x)G^\dagger(x) \\ A_\mu(x) & \longrightarrow & G(x)A_\mu(x)G^\dagger(x) - \frac{i}{g}G(x)\partial_\mu(x)G^\dagger(x) \ . \end{array} \tag{2.5}$$

Für die lokal eichinvariante Lagrangedichte der freien Quarks ergibt sich somit

$$\mathcal{L}_F(x) = \sum_{a,f} \bar{\psi}^{a,\alpha,f}(x)(i\not{D} - m_f)_{\alpha\beta}\psi^{a,\beta,f}(x) \ . \tag{2.6}$$

Um die Dynamik der Gluonen zu berücksichtigen, muß der Lagrangedichte ein weiterer, rein gluonischer Term hinzugefügt werden

$$\mathcal{L}_G(x) = -\frac{1}{2}\mathrm{Sp}(F_{\mu,\nu}F^{\mu,\nu}) = -\frac{1}{4}(F^a_{\mu,\nu}F^{\mu,\nu}_a) \ , \tag{2.7}$$

letztere Gleichung gilt aufgrund der Orthogonalitätsbeziehung der Gell-Mann Matrizen: $Sp(\lambda^a\lambda^b) = 2\delta_{ab}$. Der gluonische Feldstärketensor

$$F_{\mu,\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) - ig[A_\mu(x), A_\nu(x)] \tag{2.8}$$

weist im Unterschied zur QED aufgrund des nicht abelschen Charakters der SU(3) einen Kommutator auf, der zu Selbstwechselwirkung zwischen drei und vier Gluonen führt und aufgrunddessen die effektive Kopplung der QCD für große Abstände sehr stark wird (*Confinement*) und für kleine asymptotisch verschwindet (*asymptotische Freiheit*). Aufgrund des Kommutators transformiert sich der Feldstärketensor wie

$$F^{\mu,\nu} \quad \longrightarrow \quad G(x)F^{\mu,\nu}(x)G^{\dagger}(x) \ . \tag{2.9}$$

Die vollständige, lokal eichinvariante Lagrangedichte der QCD ist somit

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{QCD}(x) &= \mathcal{L}_F(x) + \mathcal{L}_G(x) \qquad (2.10) \\ &= \sum_{a,f} \bar{\psi}^{a,\alpha,f}(x)(i\not{D} - m_f)_{\alpha\beta}\psi^{a,\beta,f}(x) - \frac{1}{2}\mathrm{Sp}(F_{\mu,\nu}F^{\mu,\nu}) \ . \end{aligned}$$

Damit kann die Zustandssumme angegeben werden:

$$Z = \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi} \exp\Big(- iS_{QCD}(A, \Psi, \bar{\Psi})\Big) \tag{2.11}$$

$$= \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi} \exp\Big(- i\int d^4x\mathcal{L}_{QCD}(x)\Big) \tag{2.12}$$

Die Zustandssumme ist dabei die Summe über alle Feldkonfigurationen. Man hat also, um physikalisch relevante Größen zu berechnen, d.h. Observablen $\mathcal{O}$ zu bestimmen, ein Integral mit einem komplexen und daher stark oszillierenden Integranden über das zeitgeordnete Produkt der Felder zu berechnen.

$$\begin{aligned} < \mathcal{O} > &\equiv \ < 0|\mathcal{O}|0 > \\ &\equiv \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi} \ \mathcal{O}(A, \Psi, \bar{\Psi}) \ \exp\Big(- iS_{QCD}(A, \Psi, \bar{\Psi})\Big) \qquad (2.13) \end{aligned}$$

Um einen reellen Exponenten zu erhalten, geht man von der Minkowski-Metrik mit Hilfe der Wick-Rotation, d.h. durch eine Drehung der Integrationsebene, bei der die Zeit t analytisch ins Komplexe fortgesetzt wird, zur euklidischen Formulierung über. Man ersetzt also

$$\begin{aligned} t = x_0 \quad &\longrightarrow \quad -i\tau = -ix_4 \qquad (2.14) \\ \partial_t = \partial_0 \quad &\longrightarrow \quad i\partial_\tau = i\partial_4 \\ A_0 \quad &\longrightarrow \quad iA_4 \end{aligned}$$

und die Dirac-Matrizen

$$\begin{aligned} \gamma_0 \quad &\longrightarrow \quad \gamma_4^E \qquad (2.15) \\ -i\gamma_k \quad &\longrightarrow \quad \gamma_k^E \ . \end{aligned}$$

Somit verändern sich auch die Vertauschungsrelationen:

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu} \quad \longrightarrow \quad \{\gamma_\mu^E, \gamma_\nu^E\} = 2\delta_{\mu\nu} \tag{2.16}$$

Damit ist die euklidische Lagrangedichte

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{QCD}^E(x) &= \mathcal{L}_F^E(x) + \mathcal{L}_G^E(x) \qquad (2.17) \\ &= \sum_{a,f} \bar{\psi}^{a,\alpha,f}(x)(\gamma_\mu^E D^\mu - m_f)_{\alpha\beta}\psi^{a,\beta,f}(x) - \frac{1}{2}\mathrm{Sp}(F_{\mu,\nu}F^{\mu,\nu}) \end{aligned}$$

bzw. die euklidische Wirkung

$$S_{QCD}^E = \int d^4x \mathcal{L}_{QCD}^E(x) \ . \tag{2.18}$$

Die neue Zustandssumme ist nun durch ein Integral gegeben, dessen Integrand die Form eines Boltzmann-Gewichtes hat:

$$Z^E = \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi} \exp(-S_{QCD}^E(A, \Psi, \bar{\Psi})) \tag{2.19}$$

Dies schafft die Verbindung zur statistischen Mechanik und ermöglicht die numerische Berechnung des Integrals mit Hilfe von Monte Carlo-Methoden. Insbesondere kann der Erwartungswert einer Observablen in der euklidischen Formulierung als das normierte statistische Mittel betrachtet werden.

$$\begin{aligned} < \mathcal{O} > &\equiv < 0|\mathcal{O}|0 > \\ &\equiv \frac{1}{Z^E}\int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi}\ \mathcal{O}(A, \Psi, \bar{\Psi})\ \exp(-S_{QCD}^E(A, \Psi, \bar{\Psi})) \qquad (2.20) \end{aligned}$$

Dieses unendlichdimensionale Integral ist allerdings so noch nicht mathematisch wohl definiert. Um diesem eine sinnvolle mathematische Bedeutung zu geben und um die Dimension des Konfigurationsraums in Hinblick auf die numerische Auswertung endlich zu machen, führt man eine Gitterregularisierung durch.

Im folgenden ist immer von euklidischen Größen auszugehen, der Index E wird daher weggelassen.

2.3 QCD auf dem Gitter

Eine Möglichkeit, die überabzählbar vielen Freiheitsgrade, wegen derer die Pfadintegrale nicht mathematisch wohldefiniert sind, auf eine abzählbare Anzahl zu reduzieren, wird durch die Diskretisierung der räumlichen und zeitlichen Koordinaten gegeben, d.h. man legt ein vierdimensionales Raumzeitgitter über das betrachtete Volumen. Dadurch reduziert sich das Pfadintegral zu einem mehrdimensionalem Riemannintegral.

Jeder Gitterpunkt entspricht nun einem Vektor $n = (n_1, n_2, n_3, n_4) \in \mathbb{N}^4$ auf einem endlichem Gitter der Größe $N_\sigma^3 \times N_\tau$, wobei N_σ und N_τ die Anzahl der Punkte in Raum- bzw. Zeitrichtung angeben. Das physikalische Volumen wird nun über die Gitterkonstanten a in räumlicher und τ in zeitlicher Richtung durch $V = (N_\sigma a)^3 \times (N_\tau \tau)$ gegeben. Ist die Gittergröße, also N_σ oder N_τ, zu klein gewählt, verfälschen *Finite-Size-Effekte* die Meßergebnisse. Bei zu großen Gitterkonstanten tauchen *Gitterartefakte* auf, die auf die Diskretisierung zurückzuführen sind.

Aufgund des diskreten Charakters des Gitters und der Verbindung von Orts- und Impulsraum per Fouriertransformation ist der maximale Impuls durch den inversen Gitterabstand a gegeben, die Diskretisierung führt somit zum *Impuls Cut-off*. Dadurch werden die im Impulsraum ursprünglich ultraviolett divergenten Integrale endlich, hängen aber nun zusätzlich vom Impuls Cut-Off bzw. der Gitterkonstanten ab. Dies ist ganz analog zu dem aus der Störungstheorie bekannten Regularisierungsverfahren, in der die Größe der Impulse durch den Cut-Off Parameter Λ begrenzt wird. Man spricht von der *Gitterregularisierung*.

Da es mit der Gitterkonstanten a bereits eine dimensionsbehaftete Größe gibt, lassen sich alle anderen durch Multiplikation mit geeigneten Potenzen von a in dimensionslose Größen überführen,

$$\hat{\Psi}(n) = a^{3/2}\Psi(an_1, an_2, an_3, \tau n_4) \tag{2.21}$$
$$\hat{m} = am \quad , \tag{2.22}$$

sodaß das Pfadintegral keine dimensionsbehafteten Ausdrücke mehr enthält.

Beim Übergang vom Kontinuum zum Gitter ersetzt man Integrale

$$\int dx^4 \quad \longrightarrow \quad a^3\tau \sum \tag{2.23}$$

durch endliche Summen und Ableitungen durch Differenzenquotienten

$$\partial_n \Psi \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{d}[\Psi(n+\hat{n}) - \Psi(n)] \tag{2.24}$$

mit $d = a$ für die Ableitung in räumlicher Richtung und $d = \tau$ für die Abeitung in zeitlicher Richtung. Dabei bezeichnet $\hat{n}$ den Einheitsvektor auf dem Gitter und n einen beliebigen Gitterpunkt.

Die Fermionfelder auf den Gitterpunkten bilden nun über die diskretisierte Form des Differenzenquotienten in der Wirkung bilineare Ausdrücke der Form

$$\bar{\Psi}(n)\Psi(n+\hat{n}) \quad \text{bzw.} \tag{2.25}$$

$$\bar{\Psi}(x)\Psi(y) \qquad \text{mit} \quad x = n,\ y = n+\hat{n}, \tag{2.26}$$

die für $x \neq y$ nicht lokal eichinvariant sind. Um die lokale $SU(3)$-Eichsymmetrie zu erhalten, berachtet man zunächst das *Schwinger'sche Linienintegral*

$$U(x,y) = e^{ig\int_x^y dz_\mu A^\mu(z)}. \tag{2.27}$$

Da die $A^\mu(z)$ Elemente der zu $SU(3)$ gehörenden Lie-Algebra sind, ist U ein Element der Gruppe $SU(3)$. Für kleine $|y-x| \equiv \varepsilon$ ergibt sich somit

$$U(x, x+\varepsilon) = e^{ig\varepsilon_\mu A^\mu(z)}. \tag{2.28}$$

Diese Matrizen transformierern sich unter $G \in SU(3)$ wie

$$U(x,x+\varepsilon) \quad \longrightarrow \quad G(x)U(x,x+\varepsilon)G^\dagger(x,x+\varepsilon) \ , \tag{2.29}$$

sodaß bilineare Ausdrücke wie

$$\bar{\Psi}(x)U(x,x+\varepsilon)\Psi(x+\varepsilon) \tag{2.30}$$

$SU(3)$-invariant sind. Da auf dem Gitter Wege immer nur entlang der Achsen verlaufen können, ist die einfachste Art der Diskretisierung durch

$$U_{n,\mu} \equiv U_\mu(n) = e^{igdA_\mu(n)}, \tag{2.31}$$

mit $d = a$ bzw. $d = \tau$ als den kleinstmöglichen Abständen zwischen den Gitterpunkten, gegeben. Somit werden die Eichfelder A^μ auf dem Gitter mit Elementen der Eichgruppe, die auf den Verbindungen zwischen den Gitterpunkten definiert sind, identifiziert. $U_\mu(n)$ wird *Linkvariable* oder auch einfach *Link* genannt und bezeichnet die Verbindung ausgehend vom Gitterpunkt n in Richtung μ zum Nachbarn $n+\mu$. In umgekehrter Richtung ist dieser Link durch

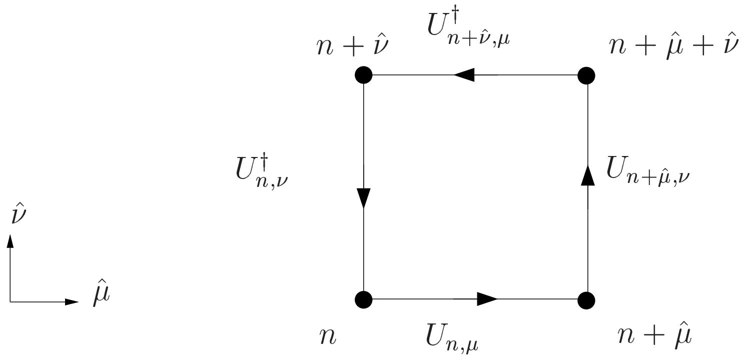
$$U^\dagger_{n,\mu} \equiv U^\dagger_\mu(n) \equiv U_{-\mu}(n+\mu) \tag{2.32}$$

definiert. Um nun einen eichinvarianten Ausdruck zu bekommen, der nur von den Linkvariablen abhängt, betrachtet man die Spur eines weggeordneten

Produktes von Links entlang einer geschlossenen Kurve, wobei es sich aufgrund der lokalen Struktur des Kontinuumterms $F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$, aber auch der Einfachheit halber, anbietet, den kleinstmöglichen Weg, eine sogenannte *Plaquette*,

$$U_{n,\mu\nu} \equiv U_{\mu\nu}(n) \equiv U_\mu(n)U_\nu(n+\hat{\mu})U_\mu^\dagger(n+\hat{\nu})U_\nu^\dagger(n) \ , \tag{2.33}$$

zu betrachten. Dabei beizeichnen $\hat{\mu}$ bzw. $\hat{\nu}$ die Einheitsvektoren in μ bzw. ν Richtung.



Die Diskretisierung der Wirkung ist allerdings nicht eindeutig. Neben der Eichvarianz wird an die Gitterformulierung aber die Forderung gestellt, daß sie für $a, \tau \to 0$ in die Kontinuumswirkung übergeht.

Will man ein endliches chemisches Potential auf einem isotropen Gitter einführen, so ergibt sich bei der naiven Verallgemeinerung der Kontinuumstheorie für freie Fermionen die Wirkung

$$S_F = a^3 \sum_x \left(ma\bar{\psi}_x\psi_x + \mu a\bar{\psi}_x\gamma_4\psi_x + \frac{1}{2}\sum_{\mu=1}^{4}\left(\bar{\psi}_x\gamma_\mu\psi_{x+\hat{\mu}} - \bar{\psi}_{x+\hat{\mu}}\gamma_\mu\psi_x\right)\right) \tag{2.34}$$

Betrachtet man masselose Fermionen, so gilt im thermodynamischen Grenzfall für die Energiedichte

$$\bar{e} \sim \mu^4 \ . \tag{2.35}$$

Die naive Formulierung führt aber fälschlicherweise im Kontinuumslimes zu quadratischen Divergenzen für die Energiedichte

$$\bar{e} \sim \left(\frac{\mu}{a}\right)^2 \ . \tag{2.36}$$

Hasenfratz und Karsch [5] führten einen Ausdruck für die Wirkung ein,

$$S_F = a^3 \sum_x \Bigg(ma\bar{\psi}_x\psi_x + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\left(\bar{\psi}_x\gamma_i\psi_{x+\hat{i}} - \bar{\psi}_{x+\hat{i}}\gamma_i\psi_x\right) + \frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\mu a}\bar{\psi}_x\gamma_4\psi_{x+\hat{4}} - \mathrm{e}^{-\mu a}\bar{\psi}_{x+\hat{4}}\gamma_4\psi_x\right)\Bigg) \quad , \tag{2.37}$$

der berücksichtigt, daß sich in der euklidischen Formulierung der Thermodynamik das chemische Potential wie die vierte Komponente eines imaginären, konstanten Vektorpotentials verhält. Dieser Tatsache wird bei dem naiven Zugang nicht Rechnung getragen, die abelsche Eichinvarianz wird verletzt. Im Kontinuumslimes liefert er für jede Ecke der Brillouin Zone richtige Resultate für dem Impuls Cut-off. Aufgrund der 16-fachen Entartung entspricht die Energiedichte dem 16-fachem Wert der normalen Energiedichte für freie Fermionen bei verschwindender Temperatur. Dieser Ansatz läßt sich leicht übertragen: Betrachtet man Wilson Fermionen, so verschwindet die Entartung und entsprechend der Faktor 16. Somit wird für ein anisotropes Gitter und endliches chemisches Potential μ die Wilsonwirkung durch

$$S = S_F + S_G \tag{2.38}$$

beschrieben [6], mit dem fermionischen Anteil

$$\begin{aligned} S_F = & \sum_x \bar{\Psi}_x\Psi_x \\ & -\frac{\kappa\tau}{a}\sum_{x,i}\left[\bar{\Psi}_{x+\hat{i}}(1+\gamma_i)U^\dagger_{xi}\Psi_x + \bar{\Psi}_x U_{xi}(1-\gamma_i)\Psi_{x+\hat{i}}\right] \\ & -\kappa \sum_x \left[\bar{\Psi}_{x+\hat{4}}(1+\gamma_4)U^\dagger_{x4}e^{-\tau\mu}\Psi_x + \bar{\Psi}_x U_{x4}(1-\gamma_4)e^{\tau\mu}\Psi_{x+\hat{4}}\right] \end{aligned} \tag{2.39}$$

und dem gluonischen Anteil

$$S_G = -\frac{\beta}{3}\sum_x\left[\frac{a}{\tau}\sum_{i=1}^{3} Re\ Sp(U_{x,4i}) + \frac{\tau}{a}\sum_{i<j} Re\ Sp(U_{x,ij})\right] . \tag{2.40}$$

Die Grassmann Felder genügen dabei anti-periodischen Randbedingungen in der zeitlichen Richtung

$$\begin{aligned} \psi_{(\vec{x},N_\tau+1)} &= -\psi_{(\vec{x},1)} \\ \bar{\psi}_{(\vec{x},N_\tau+1)} &= -\bar{\psi}_{(\vec{x},1)} \ . \end{aligned} \tag{2.41}$$

Nur Quark-Pfade entlang dieser Richtung tragen zur μ-Abhängigkeit der Wirkung bei. Normale Loops dagegen beschreiben eine virtuelle Erzeugung und Vernichtung von Paaren von Quarks und Antiquarks, sodaß sich deren chemisches Potential gerade gegenseitig aufhebt. Die Gitterpunkte werden ab hier anstatt durch n oder m wieder wie üblich mit x bzw. y bezeichnet, um Verwechslungen mit der nackten Fermionmasse m zu vermeiden. Diese ist für große N_σ über den *Hopping Parameter* κ durch

$$\cosh(m\tau) = \frac{4\kappa^2 + (1 - 6\kappa\tau/a)^2}{4\kappa(1 - 6\kappa\tau/a)} \tag{2.42}$$

bestimmt. Falls die zeitliche Gitterkonstante τ viel kleiner als die räumliche Gitterkonstante a und der Hopping Parameter κ klein ist, vereinfacht sich diese Relation zu

$$\kappa \approx \frac{1}{2} e^{-m\tau}. \tag{2.43}$$

Die Temperatur ist durch die Inverse der zeitlichen Ausdehnung des Gitters

$$T = (N_\tau \tau)^{-1} \tag{2.44}$$

gegeben.

Kapitel 3

Endliche Dichte

Das Verhalten von Materie bei endlicher Quarkdichte ist schon aufgrund der komplexen Phasenstruktur sehr interessant. Von besonderer Bedeutung ist es aber auch in Hinblick auf die Entwicklung des frühen Universums, auf das Innere von Neutronensternen, auf die Hochtemperatur-Farb-Supraleitung und auf die experimentell unter immer mehr Aspekten zu untersuchenden Schwerionen-Stöße. Der experimentelle Fortschritt verlangt aber auch ein besseres theoretisches Verständnis sowie quantitative bzw. qualitative Vorhersagen.

Während die QCD bei verschwindender Baryonendichte durch Standard Monte Carlo Techniken numerisch gut zu erfassen ist, versagen diese, sobald man ein endliches chemisches Potential betrachtet, da dann die Determinante des Diracoperators komplex wird und somit das die Theorie definierende euklidische Pfadintegral kein Gibbs'sches, d.h. kein positives, reelles Maß mehr hat. Dieses ist aber gerade die Voraussetzung für die wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation, sodaß die Fermiondeterminante nicht als Gewicht zur Erzeugung neuer Konfigurationen bei Monte Carlo Rechnungen mit *Importance Sampling* genutzt werden kann. Es treten negative Vorzeichen auf, deren Fluktuationen, wenn man sie in die Observablen miteinbezieht, zu sehr starken Auslöschungen führen können. Dies bezeichnet man im allgemeinen als das *Vorzeichenproblem*.

Neben dem üblichen Zugang über die großkanonische Formulierung bei vorgegebenem chemischem Potential kann die Thermodynamik auch kanonisch beschrieben werden. Hierbei wird dann direkt die Baryonenzahl festgelegt.

In Abschnitt 3.1 werden in diesem Kapitel zunächst die prinzipiellen Unterschiede des großkanonischen und des kanonischen Zugangs diskutiert. Einführend in die QCD bei endlicher Quarkdichte werden, im folgenden

Abschnitt, zunächst für verschiedene Grenzfälle im chiralen Limes, d.h bei relativ kleiner Quarkmasse, Phasendiagramme der QCD in Abhängigkeit der Temperatur T, des chemischen Potentials μ, der Masse m und der Flavour f vorgestellt und in Zusammenhang mit experimentellen Untersuchungen gebracht. Ausgehend von verschwindender Temperatur wird in 3.2.1 die Struktur des Phasendiagrams mit wachsendem chemischen Potential μ erläutert. In nächsten Abschnitt 3.2.2 wird dann der Fall endlicher Temperaturen und endlicher Baryondichte für verschiedene Parameter beschrieben. Nachdem kurz die Massenabhängigkeit diskutiert wurde, wird im Abschnitt 3.3 der Formalismus der kanonischen Beschreibung für den entgegengesetzten Grenzfall unendlicher schwerer Quarks und unendlichem chemischen Potential (bei endlichem Verhältnis), dem statischen Limes, vorgestellt, um in diesem den Übergang zum Hochtemperatur-Limes, Abschnitt 3.4.1, und zu sehr kleinen Dichten, Abschnitt 3.4.2, somit zu einem erweiterten dreidimensionalen 3-Zustands-Pottsmodell, zu vollziehen. Abschnitt 3.4.3 stellt, ausgehend von der kanonischen Beschreibung in diesem Grenzbereich, wieder den Zusammenhang zur großkanonischen Formulierung her. Im letzten Abschnitt, 3.4.4, wird der Umgang mit dem Vorzeichenproblem in Bezug auf die Bestimmung der Erwartungswerte vorgestellt. Weiterhin werden einige wichtige Observablen eingeführt.

3.1 Kanonisches und großkanonisches Ensemble bei endlicher Dichte

Üblicherweise wird eine endliche Dichte im großkanonischen Formalismus durch ein endliches chemisches Potential μ eingeführt. Einen alternativen Zugang bietet der kanonische Ansatz [7]. Hier wird die Baryonenzahl $\mathbf{B}$ bzw. Quarkzahl $B = 3\mathbf{B}$, d.h. die Differenz aus der Anzahl der Teilchen N und Antiteilchen $\overline{N}$, also $B = N - \overline{N}$, exakt erhalten. Allerdings können bei ausreichend hohen Temperaturen Teilchenpaare erzeugt werden. Im großkanonischen Formalismus ist dagegen nur der Erwartungswert der Baryonenzahl $\langle\ \mathbf{B}\ \rangle$ erhalten. Im thermodynamischen Limes, d.h. bei sehr großem Volumen und großer Teilchenzahl, sind beide Ansätze äquivalent. Insbesondere eignet sich der großkanonische Ansatz gut, um eine endliche Teilchendichte bei großen Systemen einzuführen. Falls man jedoch kleine Systeme mit wenig Teilchen betrachtet, wie z. B. bei Kernstößen, ist man möglicherweise zu weit vom thermodynamischen Limes entfernt, sind die relativen Teilchenzahl-Fluktuationen sehr groß, so daß sich für solche Systeme eher die direkte Einführung der Baryonenzahl im kanonischen Formalismus eignet. Die kanonische Zustandssumme $Z_c(B,T,V)$ erhält man durch die Fourierintegration über die großkanonische Zustandssumme $Z_{gc}(i\phi,T,V)$:

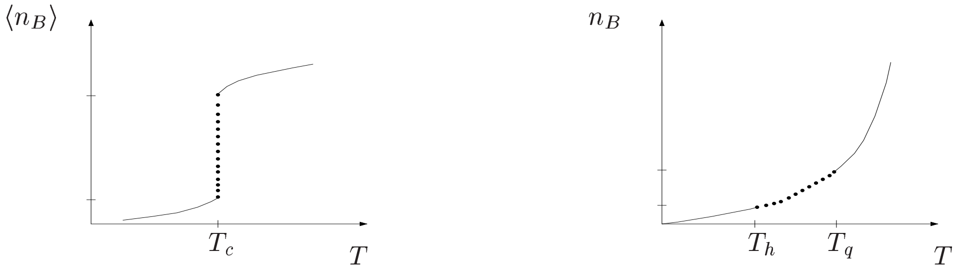
$$Z_c(B,T,V) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \mathrm{e}^{-iB\phi} Z_{gc}(i\phi,T,V). \tag{3.1}$$

Im Gegensatz zum großkanonischen Ansatz, bei dem mit endlichem chemischem Potential die Fermion-Determinate komplex wird, bleibt beim kanonischen Ansatz aufgrund des imaginären chemischen Potentials die Determinante reell. Problematisch aber ist hier der stark oszillierende Integrand. Die Fourierintegration kann jedoch explizit ausgeführt werden, sodaß man im statischen Limes durch eine Hoppingparameterentwicklung einen numerisch noch handhabbaren Ausduck erhält. Das Vorzeichenproblem ist jedoch beiden Ansätzen gemein. Der numerische Aufwand erhöht sich mit zunehmender Dichte und Volumen beträchtlich, besonders in der ungeordneten Phase. Simulationen sind somit bei größer werdenden Dichten auf immer kleinere Volumina bzw. einen immer kleiner werdenden Bereich der Kopplung β eingeschränkt. Dies begrenzt a priori die Möglichkeiten der Volumenvariation und somit die Analyse des Finite Size Scaling. Insgesamt, so stellte sich heraus, sind in beiden Ansätzen die durch das Vorzeichen bedingten Auslöschungen direkt um die kritische Kopplung β_c allerdings relativ gering.

Im großkanonischen Ansatz findet ein möglicher Phasenübergang erster Ordnung bei einem kritischen chemischen Potential μ_c und einer kritischen Temperatur T_c statt. Observablen wie die Baryonendichte und der Polyakov Loop, die im statischen Limes über den Realteil des letzteren miteinander verknüpft sind, verhalten sich diskontinuierlich. Anders dagegen im kanonischen Fall: Hier hängt die Baryonendichte stetig von der Temperatur T bzw. der Eichkopplung β ab,

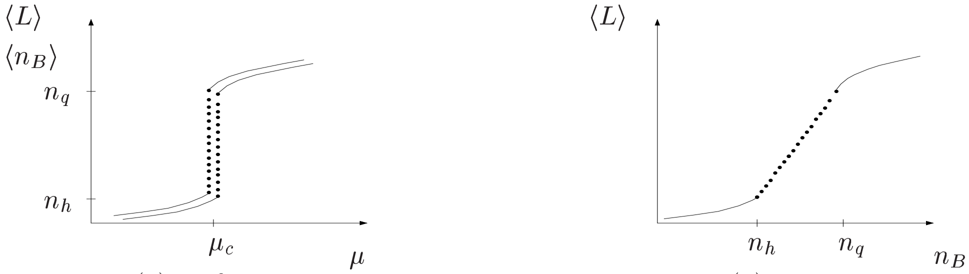
$$n_B(T) = \frac{B}{3}\left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^3 T^3 \quad , \tag{3.2}$$

wobei N_τ bzw. N_σ die Größe des Gitters in zeitlicher und räumlicher Richtung bezeichnet. Variiert man bei fester Quarkzahl B auf einem gegebenem Gitter die Kopplung β, so ändert sich die Baryonendichte kontinuierlich, und zwar um so stärker, je größer die Baryonenzahl ist. Der Phasenübergang findet innerhalb eines endlichen Dichte- und Temperaturintervalls statt. Selbst bei einem Phasenübergang erster Ordnung ändern sich Observablen wie der Polyakov Loop nicht sprunghaft, sondern variieren einfach stark mit zunehmender Kopplung β in einem sich mit größer werdender Baryonenzahl verbreiternden Bereich. Siehe hierzu auch Abb. 3.1, 3.2, 3.3, 5.10.



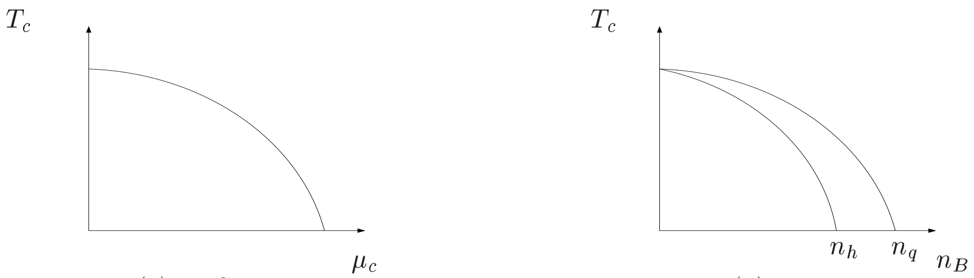
(a) großkanonisch (b) kanonisch

Abbildung 3.1: *Gegenüberstellung der Temperaturabhängigkeit der Quarkdichte im Großkanonischen, $\langle n_B \rangle$, und Kanonischen, n_B, in der Gitterformulierung. Der gepunktete Bereich kennzeichnet jeweils den Phasenübergangsbereich erster Ordnung, T_h und T_q die Temperaturen, bei denen der Übergang einsetzt bzw. abgeschlossen ist. In (b) ist insbesondere der durch Gleichung (3.2) gegebene funktionelle Zusammenhang dargestellt, d.h. B und nicht n_B wie im Kontinuum wird in der Gitterformulierung der kanonischen Zustandssumme festgehalten.*



(a) großkanonisch (b) kanonisch

Abbildung 3.2: *Zusammenhang zwischen dem Verlauf des Polyakov Loops und der Quarkdichte im Großkanonischen und Kanonischen. Der gepunktete Bereich kennzeichnet jeweils die sich entsprechenden Phasenübergangsbereiche erster Ordnung. Im Großkanonischen verhalten sich Observablen wie der Erwartungswert des Polyakov Loops und der der Quarkdichte diskontinuierlich und das System, da es aus mehreren Phasen unterschiedlicher Dichte besteht, unterliegt starken Dichtefluktuationen. Im Gegensatz hierzu gibt man im kanonischen die Quarkzahl fest vor, sodaß man auch diesen Phasenübergangsbereich erster Ordnung kontinuierlich durch Variation der Quarkdichte durchlaufen kann. Dementsprechend verhalten sich auch die Observablen analytisch. Weiterhin ergibt sich hierdurch im Phasenraumdiagramm ein endlicher Dichtebereich, in dem sich der Übergang vollzieht, s. a. Abb. 3.3 und 5.10 .*



(a) großkanonisch

(b) kanonisch

Abbildung 3.3: *Schematische Gegenüberstellung des großkanonischen $T-\mu$ und des kanonischen $T-n_B$ Phasendiagramms für einen Phasenübergang erster Ordnung. Im Kanonischen zeigt sich der endliche Dichtebereich, in dem sich der Übergang vollzieht.*

3.2 Das Phasendiagramm bei endlicher Dichte

Wesentlich für das Phasendiagramm der QCD sind der Bereich der hadronische Phase bei niedrigen Temperaturen und Dichten, in dem Quarks und Gluonen gebundene Zustände bilden und in dem *Color-Confinement* herrscht sowie der Bereich des Quark-Gluon-Plasmas bei hohen Temperaturen und bzw. oder großen Dichten, welches z.B. bei Schwerionen-Stößen und im frühen Universum bzw. in Neutronensternen vorliegt und indem sich die Quarks und Gluonen ungebunden bewegen können, s. a. Abb. 3.4. Diese Phase ist somit durch *Color-Deconfinement* gekennzeichnet und seit langem durch die Gittereichtheorie der QCD vorhergesagt worden.

Nun geben auch Experimente am CERN (SPS) erste Hinweise (Radialer Fluß, Strangeness Anreicherung, Anreicherung von Dileptonpaaren niedriger Masse, J/Ψ Unterdrückung) auf die Existenz des Quark-Gluon Plasmas. Weitere Experimente bei höheren Energien und geringeren Dichten finden derzeit am RHIC statt, Versuche bei nochmals höheren Energien und geringeren Dichten sind am LHC geplant. Somit kommt man den Zuständen, die in den ersten Mikrosekunden des Universums bestanden, immer näher und es wird sich herausstellen, ob in seiner anfänglichen Hochtemperaturphase tatsächlich ein Quark-Gluon Plasma vorherrschte.

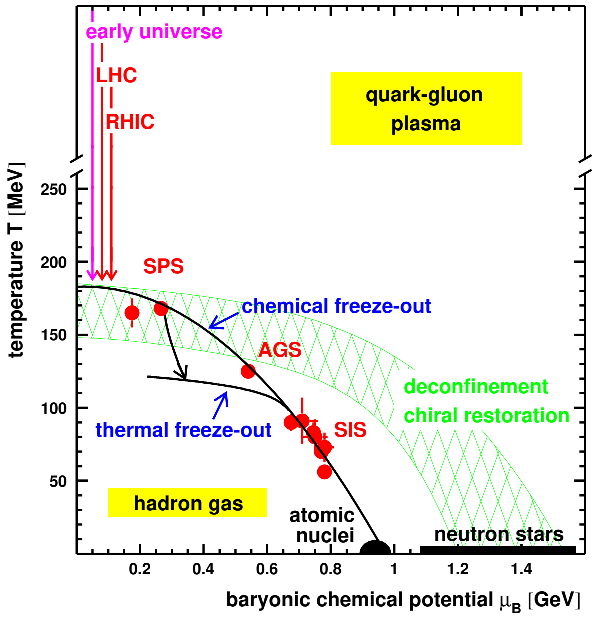


Abbildung 3.4: *Phasendiagramm hadronischer und partonischer Materie. Die hadrochemische freeze-out Punkte stammen aus der Analyse thermischer Modelle von Schwerionenstößen bei SIS, AGS und SPS Energien . Die schraffierte Region kennzeichnet den aus QCD-Gitterrechnungen bei μ=0 extrapolierten Bereich der Phasengrenzen. Der Pfeil vom chemischen zum thermischen freeze-out (SPS) entspricht der isentropischen Expansion [8].*

Um den numerischen Aufwand zu reduzieren und die Theorie zu vereinfachen, betrachtet man die QCD im Grenzfall unendlich schwerer Quarks, der sogenannten *quenched* Approximation. Im Fall unendlich schwerer Quarks und unendlichem chemischen Potential (bei endlichem Verhältnis) spricht man vom *statischen* Limes. Dieser Ansatz wird in dieser Arbeit benutzt. Betrachtet man den entgegengesetzten Grenzfall unendlich leichter Quarks, spricht man vom *chiralen* Limes, dessen numerische Untersuchung allerdings extrem schwierig ist.

Der quenched Limes reduziert die QCD auf dynamische Gluonen mit statischen Quarks. Formal bedeutet dies, daß die Fermiondeterminante konstant den Wert 1 annimmt und somit aus den Rechnungen herausfällt. Diese Approximation erlaubt es, die wesentlichen Eigenschaften des Deconfinement bei endlicher Temperatur zu untersuchen. Während im chiralen Limes die Ordnung des Überganges durch die chirale Symmetrie des fermionischen Teil in der Wirkung bestimmt wird, kontrolliert die Z(3)-Zentrums-Symmetrie die Ordnung des Überganges im quenched Limes.

3.2.1 Grenzfall verschwindender Temperatur

Betrachtet man die großkanonische Zustandssumme als Gibbs'sche Summe über alle Quantenzustände α eines thermodynamischen Systems,

$$Z_{gc} = \sum_{\alpha} \exp\left\{-\frac{E_\alpha - \mu N_\alpha}{T}\right\} , \tag{3.3}$$

so sieht man, daß im Grenzfall $T \to 0$ der Beitrag des Zustands mit dem niedrigsten Wert von $E_\alpha - \mu N_\alpha$ exponentiell dominiert. Für verschwindendes chemisches Potential ist dies der Vakuumzustand $\alpha = 0$ mit $N = 0$ und $E = 0$. Auch für endliches chemisches Potential $\mu < \mu_0$ bleibt der Grundzustand das Vakuum, mit

$$\mu_0 \equiv \min_{\alpha}(E_\alpha/N_\alpha) . \tag{3.4}$$

Für $\mu > \mu_0$ wird, betrachtet man freie, massive Fermionen, E_α/N_α durch Zustände minimiert, in denen die Fermionen ruhen, d.h. der Impuls $p = 0$ verschwindet und es gilt $E_\alpha/N_\alpha = m$. Der Grundzustand ist somit durch die Fermisphäre mit dem Radius $p_F = \sqrt{\mu^2 - m^2}$ gegeben, sodaß $n_B(\mu) = (\mu^2 - m^2)^{3/2}/(3\pi^2)$ gilt. Hieraus folgt, daß die Baryonenzahldichte $n_B(\mu)$ am Punkt $\mu_0 = 0$ singulär wird, also einen die beiden Phasen des Systems charakterisierenden Ordnungsparameter darstellt.

Im Falle der QCD wird die Energie pro Baryon $E/N = m_N - (Nm_N - E)/N$, wobei $m_N = m_p$ ungefähr der Nukleonmasse m_n entspricht, durch Zustände minimiert, deren Bindungsenergie pro Nukleon $\epsilon = (Nm_N - E)/N$ maximal ist. Diese ergibt sich über die Weizsäcker-Formel zu 16 MeV [9], sodaß die Dichte bei $\mu = \mu_0 \approx m_N - 16$ MeV auf den Wert der Dichte nuklearer Materie $n_0 \approx 0.16\,\mathrm{fm}^{-3}$ springt (s. Abb. 3.5). Dies bedeutet, daß in der QCD ein Phasenübergang erster Ordnung stattfindet, der durch die Diskontinuität von $n_B(\mu)$ bei $\mu = \mu_0$ charakterisiert wird.

Für sehr großes chemisches Potential, $\mu \gg \Lambda_{QCD}$, besetzen die Quarks aufgrund des Pauli-Prinzips Zustände immer höherer Energie, sodaß aufgrund der asymptotischen Freiheit die Wechselwirkung nahe der Fermioberfläche schwach ist. Bei niedrigen Temperaturen tragen nur Quarks nahe der Fermioberfläche zur Debye-Abschirmung der Eichfelder bei. Das Quadrat der Abschirmmasse, m_D^2, ist proportional zur Fläche der Fermioberfläche: $m_D^2 \sim g^2\mu^2$. Dies bedeutet, daß die Farbwechselwirkung auf einer Länge $\mathcal{O}(1/g\mu) = \mathcal{O}(\sqrt{\ln(\mu/\Lambda_{\mathrm{QCD}})}/\mu)$ abgeschirmt wird und somit nichtstörungstheoretische Phänomene wie chirale Symmetriebrechung bei genügend großem chemischem Potential nicht mehr vorherrschen. Somit ist in der QCD mit masselosen Quarks ein weiterer Phasenübergang bei einem Wert μ_1 des chemischen Potentials (siehe auch hier Abb. 3.5), an dem die chirale Symmetrie restauriert wird, zu erwarten. Verschiedene Betrachtungen führen alle zu dem Schluß, daß μ_1 endlich ist und daß $\mu_1 - \mu_0$ in der Ordnung von $\Lambda_{\mathrm{QCD}} \approx 200\,\mathrm{MeV} \approx 1\,\mathrm{fm}^{-1}$ liegt. Dies ergibt sich beispielsweise, wenn man den Druck der Quarks minus der *MIT bag constant* dem Druck nuklearer Materie gleichsetzt. Das *MIT bag model* [11] sagt einen Phasenübergang erster Ordnung voraus, da die Baryonenzahldichte diskontinuierlich ist. Das *Nambu-Jona-Lasinio model* [12] führt zu ähnlichen Schätzungen für μ_1, zeigt allerdings, daß die Ordnung für großen Gitter Cutoff zweiter, für kleinen erster Ordnung ist. Das *random matrix model* [13] sagt für $T = 0$ allerdings ebenfalls einen Phasenübergang erster Ordnung voraus.

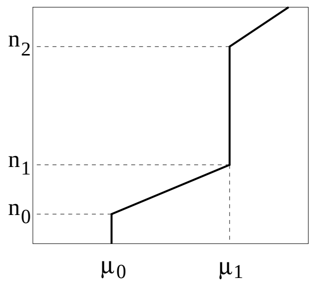


Abbildung 3.5: *Abhängigkeit der Baryonendichte von dem chemischen Potential bei $T = 0$ ($\mu_0 \approx m_N - 16$ MeV) [10].*

3.2.2 Endliche Temperatur und chemisches Potential

Bei endlichem T ist die Baryonendichte $n_B > 0$ für bel. $\mu > 0$ und somit kein exakter Ordnungsparameter mehr. Trotzdem ist sie ein guter Indikator für die Natur des Phasenübergangs. Für sehr kleine T und μ findet man ein stark verdünntes Gas leichter Mesonen, Nukleonen und Antinukleonen mit

$$n_B(T,\mu) \approx \frac{\mu}{T} \left(\frac{2 m_N T}{\pi} \right)^{3/2} e^{-m_N/T} \ . \tag{3.5}$$

Aus Kontinuitätsgründen folgt nun, daß der Phasenübergang erster Ordnung bei $T = 0$, $\mu = \mu_0$ für genügend kleine T als Phasenübergang erster Ordnung bestehen bleibt. Aus der verallgemeinerten Clausius-Clapeyron-Gleichung folgt, daß die Steigung der Phasenraumkurve $dT/d\mu$ bei $T = 0$ unendlich ist. Da es keinen symmetriebrechenden, die zwei Phasen unterscheidenden Ordnungsparameter gibt, ist zu erwarten, daß beide Phasen analytisch zu verbinden sind, mit anderen Worten, es ist davon auszugehen, daß die Phasenübergangslinie in Analogie zum Gas-Flüssigkeit-Übergang an einem kritischen Punkt endet. Über die Bindungsenergie pro Nukleon in kalter Materie wird die kritische Temperatur T_0 auf $\mathcal{O}(10\,\mathrm{MeV})$ geschätzt.

Für sehr große Temperaturen, $T \gg \Lambda_{\mathrm{QCD}}$, liegt ein Plasma aus Quarks und Gluonen mit einer logarithmisch kleinen effektiven Kopplungskonstante

$g(T)$ vor, sodaß auch in diesem Grenzfall die Baryonendichte n_B berechnet werden kann.

$$n_B(T,\mu) \approx 4 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[\exp\frac{|\boldsymbol{p}| - \mu/3}{T} + 1\right]^{-1} - \{\mu \to -\mu\} . \tag{3.6}$$

Da aufgrund der asymptotischen Freiheit die effektive Kopplung schwach ist, verschwindet das chirale Kondensat $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ (pro Flavor),

$$\langle\bar{\psi}\psi\rangle\ V = -\frac{1}{N_f}\frac{\partial\Omega}{\partial m} , \tag{3.7}$$

für sehr große Temperaturen. Dabei bezeichnet Ω das großkanonischen Potential. Somit ist das chirale Kondensat $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ als ein den Phasenübergang von der hadronischen Niedrigtemperaturphase zur Quark-Gluon-Phase charakterisierenden Indikator anzusehen. Dieser Übergang wurde für verschwindendes chemisches Potential $\mu = 0$ mit verschiedenen Methoden untersucht. Effektive Landau-Ginsburg Theorien, so genannte lineare σ-Modelle, sagen für verschwindende Quarkmassen einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit O(4) kritischen Exponenten für 2 entartete Flavour und einen erster Ordnung für drei entartete Flavour voraus [15]. Dies wird durch Simulationen von A. Peikert et al. [14] zu verschiedenen Massen für 2+1 Flavour bestätigt. Für die kritische Temperatur ergibt sich hiernach $T_c \approx 160 - 170$ MeV.

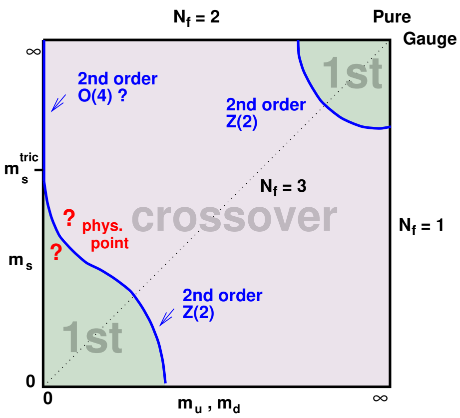


Abbildung 3.6: *QCD-Phasendiagram für 2+1 Quark Flavour. [14]*

Für masselose Quarks ist das chirale Kondensat $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ ein exakter Ordnungsparameter, der Erwartungswert verschwindet exakt in der Quark-Gluon Phase und ist endlich in der hadronischen Phase mit spontan gebrochener chiraler Symmetrie. Betrachtet man zwei masselose Flavour, s. Abb. 3.7, so erstreckt sich aus Kontinuitätsgründen die Phasenübergangslinie zweiter Ordnung vom Punkt $T = T_c$, $\mu = 0$ in die $T - \mu$ Ebene hinein. Ebenso setzt sich für $T = 0$ der die chirale Symmetrie restaurierende Phasenübergang erster Ordnung in die $T - \mu$ Ebene fort. Da der Ordnungparameter $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ identisch null ist, kann die Phasenübergangslinie erster Ordnung nicht enden, sondern trifft mit der Phasenübergangslinie zweiter Ordnung zusammen [10]. Sobald man allerdings zu

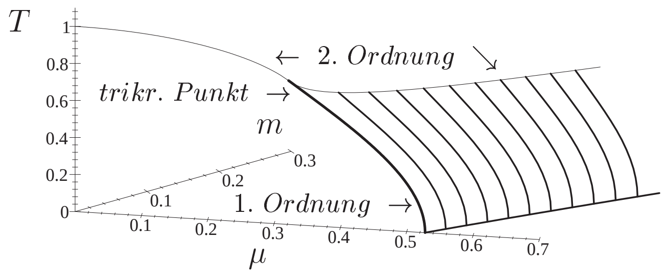


Abbildung 3.7: *Darstellung des trikritischen Punktes im QCD Phasendiagramm mit zwei leichten Flavourn der Masse m, wie es sich aus dem Random Matrix Model [13] ergibt. Die fast parallelen Kurven auf der Oberfläche entsprechen dem Schnitt durch diese Fläche mit Ebenen mit m =const . Die Einheit von m ist $\sigma \approx 100$ MeV, die von T ist $T_c \approx 160$ MeV und die von μ sind $\mu_1/0.53 \approx 2300$ MeV . [10]*

endlichen Quarkmassen übergeht, wird die chirale Symmetrie explizit gebrochen und das chirale Kondensat $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ ist kein exakter Ordnungsparameter mehr. Die von $T = 0$ ausgehenden Phasenübergangslinien erster Ordnung enden bei endlichem μ. Erweitert man das Phasenraumdiagramm um den Massenparameter m, so treten also für $+m$ und $-m$ zwei Flächen von der Phasenübergangslinie für $m = 0$ aus, die durch eine Linie kritscher Punkte begrenzt werden. Auf diesen Flächen koexistieren Phasen hoher und niedriger Dichte. Insgesamt gibt es somit eine Phase hoher Dichte und zwei Phasen niedriger Dichte mit entgegengesetztem Vorzeichen der Masse, sodaß sich in der Symmetrieebene mit $m = 0$ am Treffpunkt der Phasenraumlinien erster und zweiter Ordnung ein trikritischer Punkt ausbildet.

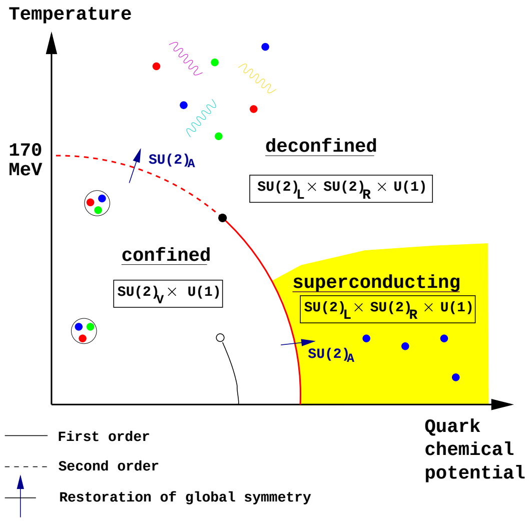


Abbildung 3.8: *Vermutetes Phasendiagramm der QCD mit zwei masselosen Flavourn. Man beachte den trikritischen Punkt (schwarz), und die exotische "supraleitende Phase" bei hohen Dichten und niedrigen Temperaturen [16] .*

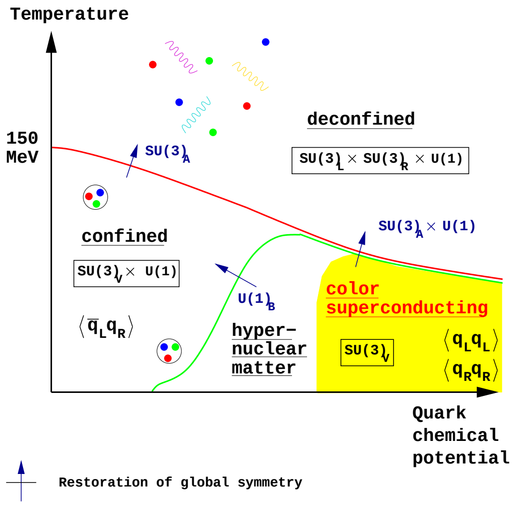


Abbildung 3.9: *Vermutetes Phasendiagramm der QCD mit drei masselosen Flavourn. In den Rechtecken werden die ungebrochenen globalen Symmetrien angegeben. Die supraleitende Phase bricht die Baryonzahlerhaltung und Chiralität [16].*

3.3 QCD bei nicht verschwindender Baryonenzahl (statisch)

Ausgehend von der Wilson Wirkung für endliches chemisches Potential projiziert man durch Fourierintegration (3.1) über die großkanonische Zustandssumme auf einen Sektor mit bestimmter Baryonenzahl [7]. Im folgenden wird für ein anisotropes Gitter gezeigt, wie diese Fourierintegration explizit ausgeführt werden kann [17].

In dem fermionischen Teil der Wilson Wirkung (2.39),

$$\begin{aligned} S_F = & \sum_x \bar{\Psi}_x \Psi_x \\ & -\frac{\kappa\tau}{a} \sum_{x,i} \left[\bar{\Psi}_{x+\hat{i}} (1+\gamma_i) U^\dagger_{xi} \Psi_x + \bar{\Psi}_x U_{xi} (1-\gamma_i) \Psi_{x+\hat{i}} \right] \\ & -\kappa \sum_x \left[\bar{\Psi}_{x+\hat{4}} (1+\gamma_4) U^\dagger_{x4} e^{-\tau\mu} \Psi_x + \bar{\Psi}_x U_{x4} (1-\gamma_4) e^{\tau\mu} \Psi_{x+\hat{4}} \right] \quad , \end{aligned} \tag{3.8}$$

läßt sich die Abhängigkeit vom chemischen Potential auf die letzte Zeitscheibe reduzieren, indem man die Fermionfelder transformiert,

$$\begin{aligned} \psi_{(\vec{x},x_4)} &= e^{\mu\tau x_4} \Psi_{(\vec{x},x_4)} \\ \bar{\psi}_{(\vec{x},x_4)} &= e^{-\mu\tau x_4} \bar{\Psi}_{(\vec{x},x_4)} \quad . \end{aligned} \tag{3.9}$$

Betrachtet man ein beliebiges x mit $x_4 \neq N_\tau$, so gilt

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_{(\vec{x},x_4)} \cdots e^{\tau\mu} \Psi_{(\vec{x},x_4+1)} &= \bar{\psi}_{(\vec{x},x_4)} e^{\mu\tau x_4} \cdots e^{\tau\mu} e^{-\mu\tau(x_4+1)} \psi_{(\vec{x},x_4+1)} \\ &= \bar{\psi}_{(\vec{x},x_4)} \cdots \psi_{(\vec{x},x_4+1)} \quad . \end{aligned}$$

Bei der letzten Zeitscheibe sind allerdings die antiperiodischen Randbedingungen zu berücksichtigen. Somit ergibt sich für ein x mit $x_4 = N_\tau$

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_{(\vec{x},N_\tau)} \cdots e^{\tau\mu} \Psi_{(\vec{x},N_\tau+1)} &= \bar{\Psi}_{(\vec{x},N_\tau)} \cdots e^{\tau\mu} (-1) \Psi_{(\vec{x},1)} \\ &= -\bar{\psi}_{(\vec{x},N_\tau)} e^{\mu\tau N_\tau} \cdots e^{\tau\mu} e^{-\mu\tau 1} \psi_{(\vec{x},1)} \\ &= -\bar{\psi}_{(\vec{x},N_\tau)} e^{\mu\tau N_\tau} \cdots \psi_{(\vec{x},1)} \\ &= -\bar{\psi}_{(\vec{x},N_\tau)} e^{\mu/T} \cdots \psi_{(\vec{x},1)} \quad , \end{aligned}$$

letzteres über die Temperaturdefinition (2.44). Da die Jacobideterminante, sie ist gleich eins, multiplikativ verschwindet, ist der vom chemischen Potential abhängige Teil der Wirkung allein durch

$$S_F^{N_\tau}(\mu/T) = \kappa \sum_{\vec{x}} \left[e^{\mu/T} \bar{\psi}_{(\vec{x},N_\tau)} (1-\gamma_4) U_{x,4} \psi_{(\vec{x},1)} + e^{-\mu/T} \bar{\psi}_{(\vec{x},1)} (1+\gamma_4) U^\dagger_{x,4} \psi_{(\vec{x},N_\tau)} \right] \tag{3.10}$$

gegeben. Verallgemeinert man die Randbedingungen zu

$$\begin{aligned} \psi_{(\vec{x},N_\tau+1)} &= -e^{(\mu/T)}\psi_{(\vec{x},1)} \\ \bar{\psi}_{(\vec{x},N_\tau+1)} &= -e^{(-\mu/T)}\bar{\psi}_{(\vec{x},1)} \quad , \end{aligned} \tag{3.11}$$

so verschwindet die explizite μ-Abhängigkeit sogar ganz.

Der vom chemischem Potential unabhängige Rest der Fermionwirkung kann dann durch

$$\tilde{S}_F = S_F - S_F^{N_\tau} \tag{3.12}$$

ausgedrückt werden. Berücksichtigt man noch den gluonischen Teil der Wirkung, so lautet die großkanonische Zustandssumme für ein Volumen $V = (N_\sigma a)^3$ und Temperatuer $T = 1/N_\tau \tau$ bei einem gegebenem chemischen Potential $\mu\tau$ insgesamt

$$Z(\mu/T, T, V) = \int \prod_{x,\nu} dU_{x,\nu} \prod_x d\bar{\psi}_x d\psi_x e^{-S_F^{N_\tau}(\mu/T)} e^{-S_G - \tilde{S}_F} \quad . \tag{3.13}$$

Der zentrale Punkt beim Übergang zur Beschreibung der QCD bei endlicher Baryonendichte ist nun die Fourierintegration (3.1)

$$Z_c(B, T, V) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \mathrm{e}^{-iB\phi} Z_{gc}(i\phi, T, V) \quad ,$$

ausgehend von einem komplexen chemischen Potential und der großkanonischen Zustandssumme in obiger Form, in der nur noch $e^{-S_F^{N_\tau}}$ als der verbleibende μ-abhängige Teil bei der Transformation betrachtet werden muß. Die endliche Dichte wird also allein durch Links in der vierten Richtung auf der letzten Zeitscheibe des Gitters bestimmt. Bezeichnet man wie üblich mit

$$\begin{aligned} a &= 1,\ 2,\ 3 \quad \text{die Spinoren,} \\ \alpha &= 1, ..., 4 \quad \text{die Farbe,} \\ f &= 1, ..., n_f \quad \text{das Flavour,} \end{aligned}$$

und definiert man mit $\Gamma_\pm = (1 \pm \gamma_4)$

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\vec{x}} &= \Gamma_- U_{(\vec{x},N_\tau),4}, \\ \mathcal{U}_{\vec{x}}^\dagger &= \Gamma_+ U_{(\vec{x},N_\tau),4}^\dagger, \end{aligned}$$

so ergibt sich für die Taylorentwicklung durch die Grassmann-Eigenschaften der Fermion-Felder

$$\begin{aligned} e^{-S_F^{N_\tau}(i\phi)} = & \prod_{(\vec{x},a,b,\alpha,\beta,f)} \left(1 - \kappa e^{i\phi} \bar{\psi}_{(\vec{x},N_\tau)}^{a,\alpha,f} \mathcal{U}_{\vec{x}}^{a,\alpha,b,\beta} \psi_{(\vec{x},1)}^{b,\beta,f}\right) \times \\ & \prod_{(\vec{x},a,b,\alpha,\beta,f)} \left(1 - \kappa e^{-i\phi} \bar{\psi}_{(\vec{x},1)}^{a,\alpha,f} \mathcal{U}_{\vec{x}}^{\dagger a,\alpha,b,\beta} \psi_{(\vec{x},N_\tau)}^{b,\beta,f}\right) \quad . \end{aligned} \tag{3.14}$$

Hierbei erstreckt sich das Produkt jetzt nur noch über das räumliche Gitter. Allerdings auch über 4 Spinor-, 3 Farb- und n_f Flavour-Indizes, sodaß sich für jedes $\vec{x}$ und für jedes Flavour 12 verschiedene Kombinationen ergeben. Um die Anzahl aller verschiedenen Möglichkeiten nicht noch weiter zu erhöhen, werden im folgenden keine unterschiedlichen Quarkmassen bzw. Hoppingparameter κ berücksichtigt.

Die Projektion auf eine bestimmte Baryonenzahl beruht formal darauf, daß in der Fouriertransformation alle Terme, die nicht proportional zu $e^{i\phi B}$ sind, wegfallen.

In der obigen Form besteht $e^{-S_F^{N_\tau}(i\phi)}$ aus Produkten von vorwärts bzw. rückwärts gerichteten Propagatoren mit der Fugazität z bzw. z^* und dem Hoppingparameter κ als Koeffzienten. Führt man nun das Produkt aus, so tragen letzlich nur Terme mit $\kappa^{n+\bar{n}}$ mit $B = n - \bar{n}$ zur großkanonischen Zustandssumme bei. Dies bildet die Basis für eine Entwicklung nach dem Hoppingparameter. Den größten Beitrag liefert dabei der Term mit $\bar{n} \equiv 0$, der nur aus vorwärts gerichteten Propagatoren besteht. Dieser läßt sich mit

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_i &= (\alpha_i, a_i) \\ \mathcal{A} &= (\mathcal{A}_1, ..., \mathcal{A}_B) \\ X &= (\vec{x}_1, ..., \vec{x}_B) \\ F &= (f_1, ..., f_B) \end{aligned}$$

durch

$$z^B f_B \equiv (-z\kappa)^B \sum_{X,\mathcal{C},\mathcal{D},F} \prod_{i=1}^{B} \bar{\psi}^{\mathcal{C}_i,f_i}_{(\vec{x}_i,N_\tau)} \mathcal{U}^{\mathcal{C}_i,\mathcal{D}_i}_{\vec{x}_i} \psi^{\mathcal{D}_i,f_i}_{(\vec{x}_i,1)} \quad , \tag{3.15}$$

ausdrücken. Hierzu tragen nur Terme bei, bei denen alle Elemente von $\{(\mathcal{C}_i, f_i, \vec{x}_i)\}_{i=1}^B$ und $\{(\mathcal{D}_i, f_i, \vec{x}_i)\}_{i=1}^B$ voneinander verschieden sind. Nun läßt sich die Fourierintegration explizit durchführen. Für die kanonische Zustandssumme ergibt sich so

$$Z(B,T,V) = \int \prod_{x,\nu} dU_{x,\nu} \prod_x d\bar{\psi}_x d\psi_x f_B \; e^{-S_G - \tilde{S}_F} \quad , \tag{3.16}$$

in der die Baryondichte nun allein durch f_B eingeht. Nur in höherer Ordnung müssen Beiträge von rückwärts propagierenden Quarks berücksichtigt werden. Betrachtet man allerdings den statischen Limes, so reicht die führende Ordnung der Hoppingparameterentwicklung der Fermiondeterminante und somit die Berechnung von f_B aus.

Besonders einfach ist dies in einer Eichung, in der alle Links in zeitlicher Richtung auf der letzten Zeitscheibe gleich eins sind

$$U_{(\vec{x},N_\tau),4} \equiv 1 \quad , \tag{3.17}$$

sodaß f_B nur noch von den Fermionfeldern abhängt:

$$f_B = (-2\kappa)^B \sum_{X,\mathcal{A},F} \prod_{i=1}^{B} \bar{\psi}^{\mathcal{A}_i,f_i}_{(\vec{x}_i,N_\tau)} \psi^{\mathcal{A}_i,f_i}_{(\vec{x}_i,1)} \quad . \tag{3.18}$$

Der Faktor 2 tritt auf, da gerade zwei Komponenten von Γ_- nicht verschwinden und daher die Spinorindizes α_i nur die Werte 1 und 2 annehmen. Für jeden Gitterpunkt und jedes Flavour bleiben also sechs mögliche Indexkombinationen. Führt man die Grassmann Integration aus, so können alle $\bar{\psi}$ mit allen ψ mit gleichem Flavourindex kontrahiert werden. Jedes Paar erzeugt ein Matrixelement der Inversen von $\tilde{Q}$, der Fermionmatrix zu $\tilde{S}_F$, alle Paarkombinationen die Matthew-Salam Determinante. Man erhält so insgesamt ein Produkt von n_f Determinanten der Dimension d_l mit $\sum_{l=1}^{n_f} d_l = B$,

$$\hat{f}_B = (2\kappa)^B \sum_{X,\mathcal{A},F} \prod_{l=1}^{n_f} \det \mathcal{M}_l[x,\mathcal{A}] \quad , \tag{3.19}$$

Dabei steht $\mathcal{M}_l$ für den Beitrag des l-ten Flavours, die Matrixelemente für die Quarkpropagatoren

$$\mathcal{M}_l^{i,j} = \tilde{Q}^{-1}_{((\vec{x}_j,1),\mathcal{A}_j),((\vec{x}_i,N_\tau),\mathcal{A}_i)} \quad . \tag{3.20}$$

Jedes Marixelement ist dabei von der Ordnung $\mathcal{O}(\kappa^{(N_\tau-1+|\vec{x}_i-\vec{x}_j|)})$, sodaß im statischen Limes für verschwindend kleine κ nur die Einträge mit $|\vec{x}_i-\vec{x}_j|=0$, Produkte von $\Gamma_- U_{(\vec{x}_i,k),4}$ Termen mit $k=1,..,N_\tau-1$, übrigbleiben. Da die Γ_--Matrix in Spinorraum diagonal ist, sind auch die Spinorindizes α_i und α_j gleich und es ergibt sich für jedes i ein Faktor $2^{N_\tau-1}$. Dieser Faktor tritt insgesamt B mal auf.

Die Multiplikation der SU(3)-Matrizen erzeugt gerade komplexwertige Elemente $L^{a_i,a_j}_{\vec{x}_i}$ des Polyakov Loops,

$$L_{\vec{x}} = \prod_{x_4=1}^{N_\tau} U_{(\vec{x},x_4)4} \quad . \tag{3.21}$$

Summiert über die Farbindizes tragen letzlich nur Spuren der Potenzen des Polyakov Loops bei. Aufgrund der fermionischen Natur können maximal 6 Quarks gleichen Flavours einen Gitterplatz besetzen. Entsprechend der Besetzungsmöglichkeiten gibt es sechs verschiedene Beiträge D_n zur Matthew-Salam Determinante, die durch die drei Funktionen M_i, entsprechend der

Anzahl i der Quarks mit gleichen Spinorkomponenten, gebildet werden:

$$\begin{aligned} D_1 &= 2M_1/1! \\ D_2 &= 2(M_1^2+M_2)/2! \\ D_3 &= 2(3M_1M_2+M_3)/3! \\ D_4 &= 2(4M_1M_3+3M_2^2)/4! \\ D_5 &= 20M_2M_3/5! \\ D_6 &= 20M_3^2/6! \quad , \end{aligned} \tag{3.22}$$

mit

$$M_1(\vec{x}) = \mathrm{Sp}L_{\vec{x}} \quad , \quad M_2(\vec{x}) = (\mathrm{Sp}L_{\vec{x}})^2 - \mathrm{Sp}L_{\vec{x}}^2 \quad , \quad M_3(\vec{x}) = 6 \quad . \tag{3.23}$$

Insgesamt läßt sich $\hat{f}_B$ nun durch

$$\hat{f}_B = (2\kappa)^{BN_\tau} \sum_{X,F} \prod_{k=1}^{B'} \prod_{l=1}^{n_f} D_{n_{k,l}}(\vec{x}_k) \quad , \tag{3.24}$$

ausdrücken, wobei $B' \leq B$ die Anzahl der verschiedenen Punkte $\vec{x}_k$ aus X bezeichnet, die durch $n_{k,l}$ Quarks des Flavours l besetzt sind. Dabei muß die Summe über alle Besetzungszahlen $n_{k,l}$ natürlich gerade wieder die Quarkzahl B ergeben. Ist $n_k = \sum_l n_{k,l}$, so ist die Summe aller Beiträge der verschiedenen Flavour für eine bestimmte Verteilung durch

$$\bar{D}_{n_k}(\vec{x}_k) = \sum_{n_{k,1}=0}^{\bar{n}_k} \ldots \sum_{n_{k,n_f}=0}^{\bar{n}_k} \delta(n_k - \sum_{l=1}^{n_f} n_{k,l}) \prod_{l=1}^{n_f} D_{n_{k,l}}(\vec{x}_k) \quad , \tag{3.25}$$

mit $\bar{n}_k = \min(n_k, 6)$, gegeben. Gleichung (3.24) reduziert sich hiermit

$$\hat{f}_B = (2\kappa)^{BN_\tau} \sum_X \prod_{k=1}^{B'} \bar{D}_{n_k}(\vec{x}_k) \quad . \tag{3.26}$$

In dieser Form scheint der numerische Aufwand zur Berechnung von $\hat{f}_B$ aufgrund der B-fachen Summe über das Volumen recht groß, d.h. von der Ordnung $\mathcal{O}(V^B)$ zu sein. Durch eine Clusterzerlegung [17] jedoch reduziert sich dieser auf die Bestimmung der Momente $\bar{D}_i$ sowie deren Mittelwerte für eine bestimmte Konfiguration.

Insgesamt ergibt sich

$$\hat{f}_B = (2\kappa)^{BN_\tau} \sum_{\{g_\alpha\}} \delta\Big(B - \sum_{l=1}^{6n_f} \sum_{\{\alpha\}} l g_\alpha a_l\Big) \times \prod_{\{\alpha\}} \frac{1}{g_\alpha!} F(\alpha)^{g_\alpha} \quad . \tag{3.27}$$

Hierbei steht

$$F(\alpha) \equiv (-1)^{(\sum_{l=1}^{6n_f} a_l - 1)} \Big((\sum_{l=1}^{6n_f} a_l - 1)! \Big[\prod_{l=1}^{6n_f} \frac{1}{a_l!} \bar{D}_l^{a_l} \Big] \Big) \tag{3.28}$$

gerade für einen durch einen bestimmten Satz $\alpha = (a_1, ..., a_{6n_f})$ von Besetzungszahlen gekennzeichneten Cluster und g_α für dessen Entartung. Das Produkt läuft dabei über alle α mit

$$\sum_{l=1}^{6n_f} l a_l \leq B \quad . \tag{3.29}$$

$\bar{D}_l$ bezeichnet die Summe der $\bar{D}_l(\vec{x})$ über das gesamte Gitter für eine gegebene Konfiguration. Diese Mittelwerte sind Ursache für den nicht lokalen Charakter von $\hat{f}_B$, das somit für jeden Update in Monte Carlo Simulationen neu berechnet werden muß. Obwohl sich die Berechnung von $\hat{f}_B$ durch die Clusterzerlegung auf einfache Summen über Produkte der $\bar{D}_n$ reduziert, steigt der numerische Aufwand durch die Zahl der insgesamt beitragenden Terme mit wachsendem B rasant an. Betrachtet man beispielsweise ein System mit 12 Quarks, so müssen, selbst wenn man nur ein Flavour berücksichtigt, 2739 Terme berechnet werden. Dies beschränkt Untersuchungen auf Systeme mit einer relativ kleinen Anzahl von Quarks, so daß hierdurch, selbst ohne Berücksichtigung des Vorzeichen-Problems, bei größeren Volumina nur geringe Dichten betrachtet werden können bzw. bei vorgegebener Dichte die Möglichkeit zum Finite Size Scaling kaum gegeben ist. Um dennoch bei vorgegebener Dichte verschiedene Volumina untersuchen zu können, ist es hilfreich, die QCD nicht nur im statischen Limes, sondern gleichzeitig auch im Grenzfall hoher Temperaturen bzw. starker Kopplung bei sehr geringen Dichten zu betrachten. Dies vereinfacht die Berechnung von $\hat{f}_B$ und reduziert die Simulationen auf ein erweitertes dreidimensionales 3-Zustands-Pottsmodell.

3.4 Grenzfall hoher Temperaturen

3.4.1 Pottsmodell

Im Hochtemperatur Limes läßt man die zeitliche Ausdehnung des Gitters bzw. das Verhältnis der Gitterkonstanten τ/a gegen 0 konvergieren. Im gluonischen Teil der Wirkung S_G (2.40),

$$S_G = -\frac{\beta}{3}\sum_x \left[\frac{a}{\tau}\sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}\ Sp(U_{x,4i}) + \frac{\tau}{a}\sum_{i<j} \mathrm{Re}\ Sp(U_{x,ij})\right] \quad ,$$

verschwindet daher, da die $SU(3)$ kompakt ist, der zweite Term. Die räumlichen Plaquetten werden somit unterdrückt. Innerhalb der Zustandssumme tragen durch die Grenzwertbildung nur Konfigurationen mit maximalen Werten der zeitlichen Plaquetten $U_{x,4i}$, $U_{x,4i} = 1$, bei, d.h. alle Terme mit $U_{x,4i} < 1$ sind für $T \to \infty$ zu vernachlässigen, im wesentlichen tragen nur Konfigurationen mit bis auf die Eichtransformation $U_{x,i}$ statischen räumlichen Linkvariablen bei, siehe z.B. Svetitsky [18]. Aufgrund

$$1 = U_{x,4i} = U_{x,4}U_{x+\hat{4},i}U^\dagger_{x+\hat{i},4}U^\dagger_{x,i} \qquad (3.30)$$

ist ein Link einer zeitlichen Plaquette äquivalent dem weggeordneten Produkt der restlichen Links der Plaquette. Betrachtet man den Polyakov Loop $L_{\vec{x}} = \prod_{x_4=1}^{N_\tau} U_{(\vec{x},x_4)4}$ an einer Stelle $\vec{x}$ und ersetzt nun gemäß dieser Gleichheit die hierin vorkommenden Links mit dem weggeordneten Produkt der jeweils restlichen Links der Plaquette und berücksichtigt noch die periodischen Randbedingungen, so verschwinden bis auf ein Paar gerade alle räumlichen Links multiplikativ (s. Abb. 3.10) und es ergibt sich

$$L_{\vec{x}} = U_{x,i}L_{\vec{x}+\hat{i}}U^\dagger_{x,i} \quad . \qquad (3.31)$$

Dies impliziert, daß die Eigenwerte von $L_{\vec{x}}$ im Raum konstant sind. Da nämlich $L_{\vec{x}}$ stets durch eine zeitunabhängige Eichtransformation diagonalisiert werden kann, kann man eine Eichung mit $L_{\vec{x}} = L$ voraussetzen. In dieser Eichung folgt dann aus (3.31), daß L mit allen

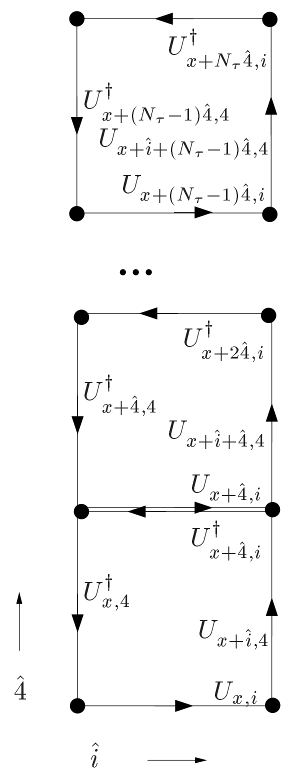


Abbildung 3.10: *Übergang Z(3)*

Linkvariablen kommutiert, daß somit $U_{x,i} = L^\dagger U_{x,i} L$ gilt.

Insgesamt folgt also, daß der Polyakov Loop für fast alle Konfigurationen ein konstantes Element des Zentrums von $SU(3)$ ist, also $L \in Z(3)$ und, da fast ausschließlich nur statische Konfigurationen zum Funktionalintegral beitragen, die zeitliche Dimension vernachlässigt werden kann. Somit ist es sinnvoll, für den Hochtemperaturlimes die Gruppe $SU(3)$ durch $Z(3)$ zu approximieren und numerische Simulationen auf ein räumliches Gitter zu reduzieren, also

$$N_t = 1$$

zu setzen. Für $\tau/a \ll 1$ sind der in der $SU(3)$ auftretende Confinement-Deconfinement-Übergang und der Phasenübergang in der $Z(3)$ völlig analog, sodaß man, insbesondere wenn man β als Analogon der Temperatur betrachtet, bei stark vermindertem numerischen Aufwand, trotz unterschiedlicher Renormalisierungseigenschaften, gut ein qualitatives Verständnis für die Natur dieses Überganges gewinnen kann. Auf nur einer Zeitscheibe vereinfachen sich die zeitartigen Plaquetten

$$U_{(\vec{x},0)4i} = U_{(\vec{x},0)4} U_{(\vec{x},0)i} U^\dagger_{(\vec{x}+\hat{\imath},0)4} U^\dagger_{(\vec{x},0)i} \quad ,$$

da der zweite und der vierte Faktor gerade die Adjungierte vom zweiten Faktor ist. Ersetzt man die Linkvariablen $U_{(\vec{x},0)4}$ durch die kommutierenden Elemente des Zentrums, $z \in Z(3)$, mit

$$z_{\vec{x}_i} = \begin{pmatrix} s_{\vec{x}_i} & & \\ & s_{\vec{x}_i} & \\ & & s_{\vec{x}_i} \end{pmatrix} \quad ,$$

$$s_{\vec{x}_i} = e^{i\frac{2}{3}\pi n_{\vec{x}_i}} \quad n_{\vec{x}_i} = 0, 1, 2 \quad , \tag{3.32}$$

so ergibt sich

$$U_{(\vec{x},0)4i} = z_{\vec{x}} z^*_{\vec{x}+\hat{\imath}} \quad .$$

Damit wird aus der reinen Eichwirkung gerade die Wirkung des dreidimensionalen drei Zustands-Pottsmodell. In diesem Sinne werden die $s_{\vec{x}_i}$ auch als Spins von Elementarmagneten interpretiert. Mit $\beta \equiv \beta\frac{\mathbf{a}}{\tau}$ gilt

$$S_G = -\beta \sum_{\vec{x}} \sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}(s_{\vec{x}} s^*_{\vec{x}+\hat{\imath}}) \quad .$$

3.4.2 Grenzfall kleiner Dichten im kanonischen Ansatz

Für den Grenzfall hoher Temperaturen vereinfacht sich auch die Berechnung des fermionischen Anteils. Mit nur einer Zeitscheibe ist der Polyakov-Loop gerade durch ein Element des Zentrums

$$L_{\vec{x}} = z_{\vec{x}} \quad , \quad z \in Z(3) \tag{3.33}$$

gegeben. Grundlegend für die Berechnung des fermionischen Anteils im kanonischen Ansatz, d.h. für die Bestimmung von $\hat{f}_B$, sind aber gerade Potenzen von Spuren des Polyakov-Loop:

$$\begin{aligned} M_1(\vec{x}) &= \mathrm{Sp}L_{\vec{x}} = 3e^{i\frac{2}{3}\pi n_{\vec{x}}} \\ M_2(\vec{x}) &= (\mathrm{Sp}L_{\vec{x}})^2 - \mathrm{Sp}L_{\vec{x}}^2 = (3e^{i\frac{2}{3}\pi n_{\vec{x}}})^2 - 3e^{i\frac{4}{3}\pi n_{\vec{x}}} = (3e^{i\frac{2}{3}\pi n_{\vec{x}}})^2 - 3e^{-i\frac{2}{3}\pi n_{\vec{x}}} \\ M_3(\vec{x}) &= 6 \quad . \end{aligned}$$

Beschränkt man sich auf auf kleine Dichten, so bedeutet dies, daß Mehrfachbesetzungen von Gitterplätzen eine verschwindend geringe Wahrscheinlichkeit besitzen. Formal ist also nur der Beitrag

$$D_1(\vec{x}) = 2M_1(\vec{x}) = 6s_{\vec{x}} \tag{3.34}$$

zu berücksichtigen. $D_2, \ldots, D_6$, werden vernachlässigt, d.h. man setzt

$$D_2 = \cdots = D_6 = 0 \quad . \tag{3.35}$$

Betrachtet man nur einen Flavour, so gilt mit $\bar{n}_k = n_f = 1$ und $n_k = \sum_l n_{k,l} = n_{k,1}$, daß

$$\bar{D}_{n_k}(\vec{x}_k) = \sum_{n_{k,1}=0}^{\bar{n}_k} \ldots \sum_{n_{k,n_f}=0}^{\bar{n}_k} \delta(n_k - \sum_{l=1}^{n_f} n_{k,l}) \prod_{l=1}^{n_f} D_{n_{k,l}}(\vec{x}_k) = D_{n_{k,1}}(\vec{x}_k) \quad . \tag{3.36}$$

Insgesamt ergibt sich mit

$$\left[\prod_l \bar{D}_{n_l}\right] \equiv \sum_{\vec{x}} \prod_l \bar{D}_{n_l}(\vec{x}) \tag{3.37}$$

$$F(\alpha) = (-1)^{(\sum_{l=1}^{6n_f} a_l - 1)} \left((\sum_{l=1}^{6n_f} a_l - 1)! \left[\prod_{l=1}^{6n_f} \frac{1}{a_l!} \bar{D}_l^{a_l} \right] \right) = \sum_{\vec{x}_k} D_1(\vec{x}_k) \quad . \tag{3.38}$$

Ein solches System besteht aus B Clustern mit einem Quark. Die Menge der Besetzungszahlen $\{\alpha\}$ ist somit durch

$$\{\alpha\} = \{(1, 0, 0, 0, 0, 0)\} \tag{3.39}$$

gegeben und es gilt

$$g_\alpha(1,0,0,0,0,0) = B \quad . \tag{3.40}$$

Insgesamt vereinfacht sich die Berechnung von $\hat{f}_B$ erheblich, da sämtliche Summen und Produkte in

$$\hat{f}_B = (2\kappa)^{BN_\tau} \sum_{\{g_\alpha\}} \delta\left(B - \sum_{l=1}^{6n_f} \sum_{\{\alpha\}} l g_\alpha a_l\right) \times \prod_{\{\alpha\}} \frac{1}{g_\alpha!} F(\alpha)^{g_\alpha} \quad , \tag{3.41}$$

abgesehen von der Summe über die Konfiguration, entfallen. Letzlich ergibt sich

$$\begin{aligned} \hat{f}_B &= (2\kappa)^B \frac{1}{B!} (\sum_{\vec{x}_i} 6 s_{\vec{x}_i})^B \\ &= (2\kappa)^B \frac{1}{B!} 6^B V^B (\sum_{\vec{x}_i} \frac{1}{V} s_{\vec{x}_i})^B \quad . \end{aligned} \tag{3.42}$$

Mit der Spindichte oder Magnetisierungsdichte

$$\bar{m} = (\sum_{\vec{x}_i} \frac{1}{V} s_{\vec{x}_i}) \tag{3.43}$$

schreibt sich $\hat{f}_B$ somit

$$\hat{f}_B = (12\kappa)^B \frac{1}{B!} V^B \bar{m}^B \quad . \tag{3.44}$$

Die kanonische Zustandssumme für den Fall hoher Temperaturen und niedriger Dichten ist folglich mit der Menge aller Konfigurationen $\{s_i\} \equiv \{(s_i)_{N_\sigma N_\sigma N_\sigma}\}$ durch

$$\begin{aligned} Z_c(\beta) &= \sum_{\{s_i\}} \hat{f}_B e^{-S_G} \\ &= (12\kappa)^B \frac{1}{B!} V^B \sum_{\{s_i\}} \bar{m}^B e^{\beta \sum_{\vec{x}} \sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}(s_{\vec{x}} s^*_{\vec{x}+\hat{i}})} \end{aligned} \tag{3.45}$$

gegeben.

3.4.3 Grenzfall kleiner Dichten im großkanonischen Ansatz

Von der kanonischen Zustandssumme für den Fall hoher Temperaturen und niedriger Dichten

$$Z_c(\beta) \quad = \quad \sum_{\{s_i\}} \hat{f}_B e^{-S_G}$$

kann man durch Summation über alle Quarkzahlen fourierintegrieren und so auch leicht wieder zum großkanonischen Formalismus übergehen: Die Entwicklung im Kanonischen nach kleinem κ unter Vernachlässigung der Antiquarks, $\bar{n} = 0$, $B = n - \bar{n} = n$, korrespondiert gerade zum statischen Limes im Großkanonischen. Betrachtet man gleichzeitig den Limes unendlichen chemischen Potentials μ, $\mu \to \infty$, und den Grenzfall unendlicher Massen m_{Quark} und somit verschwindendes κ, $\kappa \to 0$, bei einem endlichen Verhältnis von μ/m_{Quark} , so verschwinden letztlich die Beiträge der Antiquarks in der großkanonischen Zustandssumme. Somit gilt

$$\begin{aligned} Z_{gc}^{Quark} \quad &= \quad \sum_{B=0}^{\infty} Z_c e^{+\mu B} \\ &= \quad \sum_{B=0}^{\infty} e^{+\mu B} \sum_{\{s_i\}} f_B e^{-S_G} \\ &= \quad \sum_{B=0}^{\infty} e^{+\mu B} \sum_{\{s_i\}} \frac{((12\kappa)V\bar{m})^B}{B!} e^{-S_G}. \end{aligned} \tag{3.46}$$

Vertauscht man die Summen, so vereinfacht sich die großkanonische Zustandssumme weiter zu

$$Z_{gc}^{Quark} = \sum_{\{s_i\}} \sum_{B=0}^{\infty} \frac{(e^{+\mu}\kappa 12V\bar{m})^B}{B!} e^{-S_G}. \tag{3.47}$$

Führt man nun die "Statische Konstante"

$$C \equiv e^{+\mu}\kappa \tag{3.48}$$

ein, so ergibt sich für die großkanonische Zustandssumme

$$Z_{gc}^{Quark} = \sum_{\{s_i\}} \sum_{B=0}^{\infty} \frac{(12CV\bar{m})^B}{B!} e^{-S_G} \tag{3.49}$$

und unter Auflösung der Reihendarstellung der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned} Z_{gc}^{Quark} &= \sum_{\{s_i\}} e^{(12CV\bar{m})} e^{-S_G} \\ &= \sum_{\{s_i\}} e^{(-S_G + 12CV\bar{m})} \\ &= \sum_{\{s_i\}} e^{(\beta \sum_{\vec{x}} \sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}(s_{\tilde{x}} s^*_{\tilde{x}+\hat{i}}) + 12\mathrm{C}(\sum_{\tilde{x}_i} s_{\tilde{x}_i}))} \quad . \end{aligned} \tag{3.50}$$

3.4.4 Erwartungswert und Observablen bei endlicher Dichte

Wie im Kontinuum werden alle Größen von der kanonischen bzw. großkanonischen Zustandssumme abgeleitet. Im Unterschied zu verschwindenden Dichten wird der Erwartungswert jedoch gebildet, indem man die Observablen mit dem Vorzeichen gewichtet [19].

Die kanonische Zustandssumme ist aufgrund der gobalen $Z(3)$-Symmetrie nur dann von Null verschieden, wenn B ein Vielfaches von 3 ist. Nur dann ist f_B invarant unter globalen $Z(3)$-Transformationen. Letztlich tragen nur die Realteile zur Zustandssumme bei. Infolge der $Z(3)$-Symmetrie löschen sich die imaginären Anteile gerade aus, sodaß die kanonische Zustandssumme insgesamt reell ist.

Um nun trotz der auftretenden negativen Vorzeichen von einem positiven Integranden ausgehen zu können, bezieht man das Vorzeichen mit in die Bildung des Erwartungswerts ein

$$\langle \mathcal{O} \rangle_c = \frac{\langle\ \mathcal{O} \cdot \mathrm{sgn}(\mathrm{Re}\hat{f}_B)\ \rangle_{||}}{\langle\ \mathrm{sgn}(\mathrm{Re}\hat{f}_B)\ \rangle_{||}} \tag{3.51}$$

und benutzt die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z_g^{||}(\beta, B, V) &= \sum_{\{s_i\}} |\mathrm{Re}\hat{f}_B| e^{-S_G} \\ &= (12\kappa)^B \frac{1}{B!} V^B \sum_{\{s_i\}} |\mathrm{Re}(\bar{m}^B)| e^{\beta \sum_{\vec{x}} \sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}(s_{\vec{x}} s^*_{\vec{x}+\hat{i}})} \end{aligned} \tag{3.52}$$

für die Simulationen. Aus der großkanonischen Zustandssumme

$$\begin{aligned}
Z_{gc}^{Quark} &= \sum_{\{s_i\}} e^{(12CV\bar{m})} e^{-S_G} \\
&= \sum_{\{s_i\}} e^{(-S_G+12CV\bar{m})} \\
&= \sum_{\{s_i\}} e^{(-S_G+12CV((\mathrm{Re}(\bar{m}))+i\mathrm{Im}(\bar{m})))} \\
&= \sum_{\{s_i\}} e^{(-S_G+12CV(\mathrm{Re}(\bar{m})))} e^{i12CV\mathrm{Im}(\bar{m})} \\
&= \sum_{\{s_i\}} e^{(-S_G+12CV(\mathrm{Re}(\bar{m})))} \times \\
&\quad (\cos(12CV\mathrm{Im}(\bar{m})) + i\sin(12CV\mathrm{Im}(\bar{m})))
\end{aligned} \tag{3.53}$$

ergibt sich unter Vernachlässigung des Imaginärteils, analog zum kanonischen Fall

$$Z_{gc}^{||\,Quark} = \sum_{s_i} |\cos(12CV\mathrm{Im}(\bar{m}))| e^{(-S_G+12CV(\mathrm{Re}(\bar{m})))} \tag{3.54}$$

bzw. in Analogie zu $\hat{f}_B$ mit

$$\hat{f}_C \equiv (\cos(12CV\mathrm{Im}(\bar{m})) + i\sin(12CV\mathrm{Im}(\bar{m}))) e^{+12CV(\mathrm{Re}(\bar{m}))} \tag{3.55}$$

$$Z_{gc}^{||\,Quark} = \sum_{s_i} |\mathrm{Re}(\hat{f}_C)| e^{-S_G} \quad . \tag{3.56}$$

Dementsprechend berechnet sich der Erwartungswert im kanonischen Formalismus durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{gc} = \frac{\langle\ \mathcal{O} \cdot \mathrm{sgn}(\mathrm{Re}(\hat{f}_C))\ \rangle_{||}}{\langle\ \mathrm{sgn}(\mathrm{Re}(\hat{f}_C))\ \rangle_{||}} \quad . \tag{3.57}$$

Der Erwartungswert der Quarkzahl $\langle B^{Quark} \rangle$ ergibt sich durch die Ableitung des Logarithmus der großkanonischen Zustandssumme Z_{gc} nach dem chemischen Potential μ:

$$\begin{aligned}
\langle B^{Quark} \rangle_{gc} &= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\log(Z_{gc}^{Quark}) \\
&= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\log(Z_{gc}^{Quark}) \\
&= \frac{1}{\beta}\frac{1}{Z_{gc}^{Quark}}\frac{\partial}{\partial\mu}Z_{gc} \\
&= \frac{1}{\beta}\frac{1}{Z_{gc}^{Quark}}\sum_{s_i}(12CV\bar{m})e^{(12CV\bar{m})}e^{-S_G} \\
&= \frac{1}{\beta} < 12CV\bar{m} >_{gc} \quad . \qquad (3.58)
\end{aligned}$$

Unter Brücksichtigung der $Z(3)$-Symmetrie folgt analog zu oben letztlich

$$\langle B^{Quark} \rangle_{gc} = \frac{1}{\beta}\,\langle\ 12CV\mathrm{Re}(\bar{m})\ \rangle_{gc} \quad . \qquad (3.59)$$

Somit ist die mittlere Quarkzahl im großkanonischen Formalismus neben der Kopplung durch β auch von der "Statischen Konstante" C abhängig.

Die dem Polyakov Loop in der QCD entsprechende Observable ist im Pottsmodell die komplexe Magnetisierungsdichte, deren Betrag

$$\langle\ |\bar{m}|\ \rangle = \langle\ |\frac{1}{V}\sum_{\vec{x}_i} s_{\vec{x}_i}|\ \rangle \qquad (3.60)$$

als Ordnungsparameter für den Deconfinement Phasenübergang dienen kann. Dieser ist im Fall verschwindender Dichte unterhalb eines bestimmten Wertes $\beta_{critical} = \beta_c$ in der Phase mit ungebrochener Symmetrie im thermodynamischen Limes exakt null. Dieser Wert β_c definiert gerade den Punkt des Phasenüberganges erster Ordnung, an dem $\langle\ |\bar{m}|\ \rangle$ sprunghaft ansteigt.

In der QCD bestimmt der Erwartungswert des Polyakov Loops über

$$e^{f_q(T)/T} \sim |\langle L \rangle| \qquad (3.61)$$

die in einer gluonischen Umgebung durch ein Testquark hervorgerufene freie Energie $f_q(T)$ bzw. über (bei endlicher Temperatur)

$$e^{-V(\vec{x}-\vec{y},T)} = \langle \mathrm{Sp}L_{\vec{x}}\mathrm{Sp}L_{\vec{y}}^{\dagger} \rangle \underset{|\vec{x}-\vec{y}|\to\infty}{\longrightarrow} |\langle L \rangle\ |^2 \qquad (3.62)$$

das Potential V zwischen einem schweren Quark-Antiquark-Paar bei großen Abständen [20].

In der Confinement-Phase treten bei verschwindender Dichte keine Abschirmeffekte auf, sodaß daher in der ungebrochenen Phase die freie Energie und das Potential unendlich sind. Dies ist der Grund dafür, daß hier der Erwartungswert des Polyakov Loops im Grenzfall unendlichen Volumens vollkommen verschwindet.

Ist eine endliche Baryonendichte vorhanden, so bleibt das Potential schwerer Quarks selbst in der ungebrochenen Phase endlich: Die zur Messung des Potentials eingeführten statischen Quark-Antiquark Paare können mit den vorhandenen Quarks ein Baryon und ein Meson bilden, sodaß auch in der ungeordneten Phase Abschirmeffekte auftreten.

Der Polyakov Loop ist somit bei nicht verschwindender Baryonenzahl kein exakter Ordungsparameter mehr. Da der Polyakov Loop aber auch bei endlicher Baryonendichte beim Übergang von der ungebrochen Phase zur $Z(3)$-gebrochenen Phase sehr stark ansteigt, stellt er dennoch einen guten Indikator für den Deconfinement Phasenübergang dar.

In Bezug auf das Pottsmodell ist deshalb analog zu erwarten, daß sowohl im kanonischen wie im großkanonischen Formalismus die Magnetisierungsdichte stets endlich bleibt.

Um die Struktur des Deconfinementphasenüberganges besser zu verstehen, betrachtet man die, in der QCD üblicherweise durch das Fluktuationstheorem gegebene, Suszeptibilität des Polyakov Loop:

$$\chi_L = N_\sigma^3(\langle |L|^2\rangle - \langle |L|\rangle^2) \quad . \tag{3.63}$$

Die Ableitung nach dem Kopplungsparameter β,

$$\chi_\beta = (\langle |L| \times S_G\rangle - \langle |L|\rangle\langle S_G\rangle) \tag{3.64}$$

auch gemischte Suszeptibilität genannt, ist ebenfalls hilfreich, um die Entwicklung, die Kurve des Polyakov Loops mit varierender Temperatur zu analysieren.

Auf das Pottsmodell bei endlicher Baryondichte übertragen, ergibt sich so für die Suszeptibilität der Magnetisierung

$$\chi_{\bar{m}} = V(\langle\ |\bar{m}|^2\ \rangle - \langle\ |\bar{m}|\ \rangle^2) \quad .$$

oder, mit der normierten Dichte der Linkenergie

$$\bar{e} \equiv \frac{1}{3V}\sum_{\vec{x}}\sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}(s_{\vec{x}} s^*_{\vec{x}+\hat{i}}) \quad , \tag{3.65}$$

die spezifische Wärme

$$c_{\bar{e}} = V(\langle\ |\bar{e}|^2\ \rangle - \langle\ |\bar{e}|\ \rangle^2)\ \ .$$

Die gemischte Suszeptibilität läßt sich so durch

$$\chi_\beta = (\ \langle\ |\bar{m}| \times \bar{e}\ \rangle\ - \langle\ |\bar{m}|\ \rangle\langle\ \bar{e}\ \rangle\ ) \tag{3.66}$$

ausdrücken.

Allgemein ist die freie Energie f ist durch den Logarithmus der kanonischen Zustandssumme gegeben

$$f = -\frac{1}{\beta V} \ln Z\ . \tag{3.67}$$

Kapitel 4

Simulationen

In diesem Kapitel wird zunächst kurz die Idee der Monte Carlo Methode vorgestellt, Abschnitt 4.1. Im nächsten Abschnitt, 4.2, wird dann der für das erweiterte dreidimensionale 3-Zustands-Pottsmodell verwendete Heatbath-Algorithmus beschrieben. Weiterhin wird die genaue Form der in den Simulationen verwendeten Wirkung vorgestellt. Im folgende Abschnitt, 4.3, wird, am Beispiel des kanonischen Zugangs, die Histogramm-Methode für den Fall endlicher Dichte diskutiert. Der Abschnitt 4.4 stellt verschiedene Methoden der Fehleranalyse mit Hilfe der Jackknife-Methode im Falle diskreter Werte vor, u.a. den sogenannten *delete-d*-Jackknife. Danach werden im Abschnitt 4.5 Phasenübergänge klassifiziert und verschiedene Kriterien zur Bestimmung der Ordnung der Phasenübergänge erläutert. Im letzten Abschnitt, 4.6, wird eine Methode eingeführt, mit Hilfe derer auch im Fall endlicher Dichte durch Transformation der Energie und der Magnetisierung echte Ordnungsparameter erzeugt werden können und Aussagen über die Universalitätsklasse des Systems gemacht werden können.

4.1 Monte Carlo Methoden

Will man in der QCD auf dem Gitter den Erwartungswert einer Observablen

$$\langle \, \mathcal{O} \, \rangle \equiv \frac{1}{Z^E} \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi} \; \mathcal{O}(A, \Psi, \bar{\Psi}) \; \exp(-S^E_{QCD}(A, \Psi, \bar{\Psi}))$$

bestimmen, so sind hochdimensionale Integrale zu berechnen. In den konventionellen numerischen Integrationsverfahren (Trapezregel, etc.) nimmt der Fehler mit steigender Dimension d nur sehr langsam bei anwachsender Stützstellenzahl N ab ($O(N^{-2/d})$).

Ein bei mehreren Dimensionen sehr leistungsfähiges, statistisches Integrationsverfahren ist die *Monte Carlo Methode* mit *Importance Sampling*, da deren Fehler unabhängig von der Dimension d mit $N^{1/2}$ abnimmt. Da nur wenige Konfigurationen einen wesentlichen Beitrag zum Integral liefern, ist es eine sehr effiziente Methode, das Ensemble Mittel durch eine Abfolge von Konfigurationen, deren Wahrscheinlichkeitsverteilung durch den Boltzmanfaktor gegeben ist, zu berechnen. Dies ist gerade das *Importance Sampling.* Solch eine repräsentative Menge von N Konfigurationen erlaubt es, den Erwartungswert durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O_i \tag{4.1}$$

zu approximieren.

Die eigentliche Schwierigkeit reduziert sich somit auf das Problem, einen effizienten Algorithmus zu finden, der die Folge entsprechend verteilter Konfigurationen liefert.

Das theoretische Gerüst hierfür bilden *Markov-Prozesse*: Ausgehend von einer beliebigen Ausgangskonfiguration i wird ein neuer Zustand f mit der Wahrscheinlichkeit P_{if}, die nur vom alten Zustand abhängt, erzeugt. Mehrere *Markov-Prozesse* bilden sogenannte *Markov-Ketten.* Wichtig ist nun, daß durch die Markovketten, unabhängig vom Anfangszustand, jede beliebige Konfiguration erreicht werden kann, mit anderen Worten, man muß die *Ergodizität* sicherstellen.

Der Markovprozeß hat nun einen der Bolzmann-Verteilung des Zustandes x entsprechenden Fixpunkt P_x, wenn

$$P_i P_{if} = P_f P_{fi} \tag{4.2}$$

gilt, also ein *detailliertes Gleichgewicht* gegeben ist. Diese hinreichende, aber nicht notwendige Bedingung stellt die Unabhängigkeit vom Anfangszustand sicher und wird beispielsweise von Markov-Prozessen erfüllt, die durch

$$P_{if} = \alpha_{trial} \cdot \alpha_{accept} = \alpha_{trial,if} \cdot \min[1, \frac{P_f}{P_i}] \tag{4.3}$$

beschrieben werden können. Die Übergangswahrscheinlichkeit wird hier zerlegt in $\alpha_{trial,if}$, der Wahrscheinlichkeit mit der der Zustand f, startend vom Zustand i, für den nächsten Schritt in Betracht gezogen wird und der Wahrscheinlichkeit α_{accept}, daß dieser Zustand auch tatsächlich angenommen wird. Bei der Konstruktion eines Monte Carlo-Algorithmus hat man somit eine gewisse Freiheit, die man z.B. nutzen kann, um eine bestimmte Akzeptanzrate zu erzielen. Dabei soll $\alpha_{trial,if}$ symmetrisch sein.

Durch (4.3) wird gerade der bekannte Metropolis-Algorithmus beschrieben. Dieser besticht durch seine Einfachheit: Zur Implementierung wird die genaue Form des Gruppenmaßes nicht benötigt. Dieses wird automatisch per *Random Walk* erzeugt. Auch ist es leicht möglich, die Form der Wirkung oder Gruppe zu ändern.

4.2 Der Algorithmus

Will man nun einen effizienten Update konstruieren, so ist es wichtig, daß die für die neuen Zustände ausgewählten Konfigurationen auch oft akzeptiert werden. Insbesondere ist dies dann der Fall, wenn die Hamiltonian der alten und der neuen Konfiguration sich nicht allzusehr unterscheiden.

Ein Algorithmus, der völlig ohne Verwerfungen auskommt, für den also stets $\alpha_{accept} = 1$ gilt, ist der auch in den Simulationen verwendete *Heatbath*-Update.

Die Vorstellung hierbei ist, daß jeder Spin sukzessive in Wechselwirkung mit seiner Umgebung tritt, die analog zu einer echten Wärmequelle wirkt und durch thermische Fluktuationen die Ergodizität garantiert. Wird das Wärmebad entfernt, so verbleibt der Spin mit der durch das Boltzmann-Gewicht gegebenen Wahrscheinlichkeit in einem entsprechend der Gruppenmannigfaltigkeit erlaubten Zustand. Für die $Z(3)$-Eichtheorie bedeutet dies, daß für die drei möglichen Spinzustände die Wirkungen berechnet werden, um über den Boltzmann-Faktor die Wahrscheinlichkeiten zu bestimmen. Hierbei bleiben alle anderen Spins unverändert. Im Fall der endlichen Dichte wird der Boltzmannfaktor zusätzlich noch mit dem zur jeweiligen Konfiguration gehörigen Betrag des Realteils von $\hat{f}_B$ oder $\hat{f}_C$ multipliziert.

Der Algorithmus verlangt nun nach einer aus einer Gleichverteilung zufällig ausgewählten Zahl zwischen 0 und 1. Dies geschieht mittels sehr effizient arbeitender Pseudozufallsgeneratoren, deren Aufruf zeitlich mit einer Multiplikation vergleichbar ist. Die Zufallszahl wird nun mit den Wahrscheinlichkeiten verglichen. Ist sie kleiner als die durch den durch $n_{\vec{x}_i} = 0$ gekennzeichneten Spin gegebene Wahrscheinlichkeit $P_{i0_{\vec{x}_i}}$, also

$$s_{\vec{x}_i} = e^{i\frac{2}{3}\pi n_{\vec{x}_i}} \quad \text{mit} \quad n_{\vec{x}_i} = 0 \quad ,$$

so nimmt auf diesem Gitterplatz der Spin gerade diesen Zustand an. Ist sie jedoch größer gleich $P_{i0_{\vec{x}_i}}$, aber kleiner als die Summe von $P_{i0_{\vec{x}_i}}$ und $P_{i1_{\vec{x}_i}}$, so wird der neue Zustand gerade durch $n_{\vec{x}_i} = 1$ gekennzeichnet. Andernfalls nimmt der Zustand den Spin mit $n_{\vec{x}_i} = 2$ an.

Wiederholt man diesen Schritt für jeden Gitterpunkt, so repräsentiert dies gerade eine Monte Carlo Iteration und man erzeugt so den nächsten Zustand in der Markov-Kette.

Im Prinzip ist der Heatbath-Algorithmus für jede Gruppe anwendbar: Jedes Gruppenelement wird gemäß der zum Boltzmannfaktor proportionalen Wahrscheinlichkeit durch ein neues ersetzt. Da die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{if_{\vec{x}_i}}$ jedoch nicht vom Anfangszustand abhängen, ist hierdurch auch das detaillierte Gleichgewicht automatisch erfüllt. Wenn die Gruppenmannigfaltigkeit zu kompliziert ist, wird allerdings das Auswählen neuer Guppenelemente nach dem obigen Verfahren zu unhandlich bzw. zu zeitintensiv, um es effizient zu implementieren. Auch ist eine Variation der Form der Wirkung nicht trivial, da zur Implementation des obigen Auswahlverfahrens die genaue Form der Gruppe benutzt wird. Eine Beipiel für den Heatbath-Update einer kontinuierlichen Gruppe, der $SU(2)$, wird von Creutz beschrieben [2].

In den Simulationen wurde ein sogenannter even-odd Update verwendet. Hierbei wird eine Monte-Carlo Iteration in zwei Schritte zerlegt. Im ersten Schritt geht man so durch das Gitter, daß nur jeder zweite Gitterpunkt mit in den Update einbezogen wird. Hierbei überspringt man gerade die direkten Nachbarn in der Weise, daß auch bei mehrdimensionalen Gittern keine direkt benachbarten Punkte in den Update mit einbezogen werden. Bei einem zweiten Durchgang werden dann nur die ausgelassenen Gitterplätze in den Update einbezogen. Man zerlegt also das Gitter in zwei Untergitter mit der halben Anzahl der Gitterpunkte, die durch eine Translation um einen Gitterabstand in jede Koordinatenrichtung ineinander überführt werden können. Dieses Verfahren führt bei gleichbeibendem Rechenaufwand zu weit weniger korrelierten Konfigurationen.

Um die numerische Umsetzung noch zu beschleunigen, wurde anstatt der bisherigen Formulierung des Pottsmodell als sogenanntes *Clock-Modell*, die äquivalente, aber effektiver zu programmierende Formulierung als *Spinmodell* genutzt. Sie stellt gleichzeitig eine auf mehr als drei Zustände verallgemeinerte Form des Pottsmodells dar.

Für ein 3-Zustandspottsmodell gilt

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Re}(\mathrm{s}_{\tilde{\mathrm{x}}}\mathrm{s}^*_{\tilde{\mathrm{x}}+\hat{\mathrm{i}}}) &= \mathrm{Re}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi \mathrm{n}_{\tilde{\mathrm{x}}_\mathrm{i}}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi \mathrm{n}_{\tilde{\mathrm{x}}+\hat{\mathrm{i}}}}) \\
&= \cos(\frac{2}{3}\pi(n_{\vec{x}_i} - n_{\vec{x}+\hat{i}})) \\
&= \delta_{n_{\vec{x}_i},n_{\vec{x}+\hat{i}}} - \frac{1}{2}(1 - \delta_{n_{\vec{x}_i},n_{\vec{x}+\hat{i}}}) \\
&= \frac{3}{2}\delta_{n_{\vec{x}_i},n_{\vec{x}+\hat{i}}} - \frac{1}{2} \quad .
\end{aligned}
$$

Somit folgt gerade für den gluonischen Teil der Wirkung

$$
\begin{aligned}
S_G &= -\beta_{Clock} \sum_{\vec{x}} \sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}(\mathrm{s}_{\tilde{\mathrm{x}}} \mathrm{s}^*_{\tilde{\mathrm{x}}+\hat{\mathrm{i}}}) \\
&= -\frac{3}{2}\beta_{Clock} \sum_{\vec{x}} \sum_{i=1}^{3} \delta_{n_{\vec{x}_i}, n_{\vec{x}+\hat{\imath}}} + Konstante \\
&= -\beta_{Spin} \sum_{\vec{x}} \sum_{i=1}^{3} \delta_{n_{\vec{x}_i}, n_{\vec{x}+\hat{\imath}}} + Konstante \ .
\end{aligned}
$$

Dadurch ist die Kopplung β_{Spin} im *Spinmodell* um den Faktor 3/2 größer als die Kopplung β_{Clock} im *Clock-Modell*. Im folgenden ist immer $\beta \equiv \beta_{Spin}$ zu verstehen.

4.3 Die Histogramm-Methode

Monte Carlo Simulationen ergeben Erwartungswerte thermodynamischer Observablen nur zu bestimmten, vorgegebenen Parametern. Interessant aber ist in der Regel nicht nur das Verhalten des Systems an einzelnen Punkten des Phasenraumes, sondern insbesondere der Verlauf über einen kontinuierlichen Bereich. Diesen nur mit Monte-Carlo Simulationen durch einen diskreten Satz von äußeren Parametern genügend genau zu approximieren, ist sehr aufwendig. Betrachtet man Phasenübergänge, so sind aber gerade die genaue Lage und genauen Höhen von mehr oder weniger schmalen Peaks zu analysieren, um Aussagen über die Natur des Phasenübergangs treffen zu können. Zusätzlich werden deren Untersuchungen aber durch in diesem Bereich stark wachsende Korrelationen und demzufolge größere Fehler erschwert.

Ein Verfahren, das beiden Aspekten Rechnung trägt und zu einer ganz erheblichen Reduzierung des Rechenaufwands führt, ist die von Salsburg [21] eingeführte und später von Swendsen und Ferrenberg [22, 23] weiterentwickelte Histogramm-Methode.

Im folgenden wird der kanonische Fall explizit beschrieben. Trotz unterschiedlicher Anwendbarkeiten ist der großkanonische Formalismus jedoch völlig analog zu behandeln. Es sind im wesentlichen einfach die kanonische durch die großkanonische Zustandssumme und $\hat{f}_B$ durch $\hat{f}_C$ zu ersetzen.

Der zentrale Punkt dabei ist, daß die Zustandsdichte

$$\begin{aligned} & W(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) \\ = & \sum_{\{(s_i)_{N_\sigma N_\sigma N_\sigma}\}} \delta(\bar{e} - \bar{e}((s_i)))\ \ \delta(\mathrm{Re}\ \bar{m} - \mathrm{Re}\ \bar{m}((s_i)))\ \ \delta(\mathrm{Im}\ \bar{m} - \mathrm{Im}\ \bar{m}((s_i)))\ , \end{aligned}$$

unabhängig von den äußeren Parametern wie z. B. der Kopplung β oder des chemischen Potentials ist und die gesamte thermodynamische Information beinhaltet. Dabei ist $\{(s_i)\}$ die Menge der Konfigurationen $(s_i) \equiv (s_i)_{N_\sigma N_\sigma N_\sigma}$. Dadurch wird es möglich, die Meßwerte eines Parametersatzes auf einen anderen umzugewichten.

Durch die Zustandsdichte läßt sich mit $S_G \equiv \beta H_G$ die kanonische Zustandsumme durch

$$\begin{aligned} Z_c(\beta, B, V) &= \sum_{\{s_i\}} \hat{f}_B(s_i) e^{-S_G(s_i)} \\ &= \sum_{\{s_i\}} \hat{f}_B(s_i) e^{-\beta H_G(s_i)} \\ &= \sum_{\{\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}\}} W(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \hat{f}_B(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ e^{-\beta H_G(\bar{e})} \end{aligned}$$

ausdrücken und die Wahrscheinlichkeitsverteilung als

$$P_{\beta,B,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) = \frac{1}{Z_c(\beta, B, V)}\ W(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \hat{f}_B(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ e^{-\beta H_G(\bar{e})}$$

schreiben.

Diese läßt sich aber gerade mit Hilfe der Verteilung der Wirkung aus den Simulationen bestimmen. Sei $n_{\beta,B,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})$ die Anzahl der Konfigurationen mit $\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}$ einer Monte Carlo Untersuchung mit β, B, V und $n^{total}_{\beta,B,V}$ die Gesamtanzahl aller Sweeps, so strebt die relative Häufigkeit $n_{\beta,B,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})/n^{total}_{\beta,B,V}$ gerade gegen die tatsächliche Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Ist die Wahrscheinlickeitsverteilung zu einer bestimmten Kopplung β und einer gegebenen Quarkzahl B aber bekannt, so kann man im Prinzip auch die Zustandssumme oder die Wahrscheinlichkeitsverteilung zu einer anderen

Kopplung β' oder einer anderen Quarkzahl B' angeben:

$$
\begin{aligned}
&Z_c(\beta', B', V) \\
&= \sum_{\{\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}\}} W(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ e^{-\beta' H_G(\bar{e})} \\
&= \sum_{\{\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}\}} Z_c(\beta, B, V) P_{\beta,B,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e})}
\end{aligned}
$$

bzw.

$$
\begin{aligned}
&P_{\beta',B',V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) \\
&= \frac{1}{Z_c(\beta', B', V)}\ W(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ e^{-\beta' H_G(\bar{e})} \\
&= \frac{Z_c(\beta, B, V)}{Z_c(\beta', B', V)}\ \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e})}\ P_{\beta,B,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) \\
&= \frac{Z_c(\beta, B, V)\ P_{\beta,B,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e})}}{\sum_{\{\bar{e}', \mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}'\}} Z_c(\beta, B, V) P_{\beta,B,V}(\bar{e}', \mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}') \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}')}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}')}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e}')}} \\
&= \frac{P_{\beta,B,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e})}}{\sum_{\{\bar{e}', \mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}'\}} P_{\beta,B,V}(\bar{e}', \mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}') \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}')}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m}', \mathrm{Im}\ \bar{m}')}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e}')}}\ .
\end{aligned}
$$

Ebenso kann man theoretisch einen bei der Kopplung β und der Quarkzahl B gemessenen Erwartungswert einer Observablen $\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{\beta,B}$ auf die Kopplung β' und eine andere Quarkzahl B' umgewichten. Betrachtet man den Erwartungswert der Observable $\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{\beta,B}$ zu $\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}$,

$$
\begin{aligned}
&\langle\ \mathcal{O}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \rangle_{\beta',B'} \\
&= \frac{\sum_{\{s_i\}} O(s_i)\delta(\bar{e}(s_i) - \bar{e})\delta(\mathrm{Re}\ \bar{m}(s_i) - \mathrm{Re}\ \bar{m})\delta(\mathrm{Im}\ \bar{m}(s_i) - \mathrm{Im}\ \bar{m})}{W(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})}
\end{aligned}
$$

so ergibt sich

$$\begin{aligned}
&\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{\beta',B'} \\
&= \sum_{\{\bar{e},\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m}\}} \langle\ \mathcal{O}(\bar{e},\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m})\ \rangle_{\beta,B} P_{\beta',B',V}(\bar{e},\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m}) \\
&= \sum_{\{\bar{e},\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m}\}} \langle\ \mathcal{O}(\bar{e},\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m})\ \rangle_{\beta,B} \times \\
&\qquad \frac{P_{\beta,B,V}(\bar{e},\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m}) \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m})}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m})}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e})}}{\sum_{\{\bar{e}',\mathrm{Re}\ \bar{m}',\mathrm{Im}\ \bar{m}'\}} P_{\beta,B,V}(\bar{e}',\mathrm{Re}\ \bar{m}',\mathrm{Im}\ \bar{m}') \frac{\hat{f}_{B'}(\mathrm{Re}\ \bar{m}',\mathrm{Im}\ \bar{m}')}{\hat{f}_{B}(\mathrm{Re}\ \bar{m}',\mathrm{Im}\ \bar{m}')}\ e^{-(\beta'-\beta)H_G(\bar{e}')}}
\end{aligned}$$

Praktisch wird das Umgewichten jedoch durch den Bereich des Histogramms, in dem eine statistisch relevante Anzahl von Einträgen gegeben ist, eingeschränkt. Der zur Extrapolation zur Verfügung stehende Bereich nimmt dabei mit wachsender Systemgröße ab. Glücklicherweise geht dies am Phasenübergang mit der Verkleinerung der *Finite Size Scaling* Region einher, sodaß sich die Informationen über den Übergang mit größer werdendem Gitter nicht verschlechtert [24]. Da sowohl die Kopplung β wie auch das chemische Potential bzw. die "Statische Konstante" im großkanonischen Ansatz kontinuierliche Parameter sind, ist hier ein Umgewichten in Nachbarbereiche der ursprünglichen Paramter möglich. Ein Umgewichten auf andere Quarkzahlen jedoch ist insofern problematisch, da nur Vielfache von 3 physikalisch sinnvoll sind und insbesondere bei kleinen Gittern Wechsel zu den nächstmöglichen Quarkzahlen mit relativ großen Dichteänderungen bzw. Änderungen im Histogramm einhergehen. Für sehr große Quarkzahlen könnte man möglicherweise jedoch auch im kanonischen Fall sinnvolle Ergebnisse durch Umgewichten erzielen.

Eine Restriktion technischer Art stellt auch der auf einem Rechner zur Verfügung stehende Arbeitspeicher dar. Das zum Umgewichten in beiden Parametern notwendige Histogramm $n_{\beta,B,V}(\bar{e},\mathrm{Re}\ \bar{m},\mathrm{Im}\ \bar{m})$ ist ein, aufgrund der nötigen Präzision hochaufzulösendes, dreidimensionales Histogramm in einem vierdimensionalen Raum, das den zur Verfügung stehenden RAM überschreitet. Insofern mußte die tatsächliche Umgewichtung auf die Kopplung β beschränkt bleiben.

Hat man Monte Carlo Simulationen zu verschiedenen Parametern vorliegen und haben die korrespondierenden Histogramme eine genügende Überlappung, so kann man das Umgewichten auf den durch diese Parameter begrenzten Raum ausdehnen. Diese sogenannte *Multi-Histogramm Methode* wurde bereits 1972 von Valleau und Card [25] eingeführt und von Benett [26] 1976 optimiert.

Sind insgesamt K Simulationen mit β_k und B_k (oder C_k), $k = 1, \ldots, K$, mit $n^{total}_{\beta_k,B_k,V} \equiv n^{total}_k$ Messungen gegeben, so kann man eine durch die jeweiligen Zustandsdichten $W_{\beta_k,B_k,V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) \equiv W_k(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})$ gebildete, gemeinsame, gewichtete Zustandsdichte

$$W^{total}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) = \sum_{k=1}^{K} p_k(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ W_k(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})$$

angeben. Die Gewichte p_k ($\sum_{k=1}^{K} p_k = 1$) sind dabei so zu wählen, daß der Fehler in der Zustandssumme minimal ist. Dies ist gegeben, falls

$$p_k(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) = \frac{n^{total}_k (1+2\tau_k)^{-1} \hat{f}_{B_k}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) e^{-(\beta_{k'} H_G + F_{k'})}}{\sum_{k'=1}^{K} n^{total}_{k'} (1+2\tau_{k'})^{-1} \hat{f}_{B_{k'}}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) e^{-(\beta_{k'} H_G + F_{k'})}}$$

gilt [24]. τ_k ist dabei die Korrelationszeit und $F_k \equiv F_{(\beta_k,B_k,V)}$ die freie Energie der k-ten Messung. Letztlich ergibt sich hiermit für die Zustandsdichte

$$\begin{aligned} & W^{total}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) \\ &= \frac{\sum_{k=1}^{K} n_k(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})(1+2\tau_k)^{-1}}{\sum_{k'=1}^{K} n^{total}_{k'} (1+2\tau_{k'})^{-1} \hat{f}_{B_{k'}}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}) e^{-(\beta_{k'} H_G + F_{k'})}} \quad . \end{aligned} \tag{4.4}$$

Für die kanonische Zustandsfunktion selbst ergibt sich

$$\begin{aligned} & Z_c(\beta_k, B_k, V) \\ &= \sum_{\{\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m}\}} W^{total}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \hat{f}_{B_k}(\mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ e^{-\beta_k H_G(\bar{e})} \\ &= e^{-F_k} \quad . \end{aligned} \tag{4.5}$$

Die freie Energie F_k kann nun rekursiv aus (4.4) und (4.5) berechnet werden. Der umgewichtete Erwartungswert einer Observablen unter Berücksichtigung aller Simulationen berechnet sich analog zur *Single-Histogramm Methode*. Dabei werden im Unterschied allerdings die aus allen Datensätzen berechneten Zustandsfunktionen und Zustandsdichten für die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_{\beta',B',V}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})$ benutzt. Der Erwartungswert zu einer bestimmten Energie und Magnetisierung ist durch

$$\begin{aligned} & \langle\ \mathcal{O}(\bar{e}, \mathrm{Re}\ \bar{m}, \mathrm{Im}\ \bar{m})\ \rangle^{total} \\ &= \frac{\sum_{k=1}^{K} \sum_{\{s_i\}} O(s_i) \delta(\bar{e}(s_i) - \bar{e}) \delta(\mathrm{Re}\ \bar{m}(s_i) - \mathrm{Re}\ \bar{m}) \delta(\mathrm{Im}\ \bar{m}(s_i) - \mathrm{Im}\ \bar{m})(1+2\tau_k)^{-1}}{\sum_{k'=1}^{K} \sum_{\{s_i\}} \delta(\bar{e}(s_i) - \bar{e}) \delta(\mathrm{Re}\ \bar{m}(s_i) - \mathrm{Re}\ \bar{m}) \delta(\mathrm{Im}\ \bar{m}(s_i) - \mathrm{Im}\ \bar{m})(1+2\tau'_k)^{-1}} \end{aligned}$$

gegeben.

Insbesondere berechnen sich so auch die Komponenten des durch das Vorzeichen korrigierten Erwartungswerts, $\langle\, \mathcal{O} \cdot \mathrm{sgn}(\mathrm{Re}\hat{f}_B)\,\rangle_{||}$ und $\langle\, \mathrm{sgn}(\mathrm{Re}\hat{f}_B)\,\rangle_{||}$. Somit läßt sich die *Multi-Histogramm Methode* auch im besonders rechenzeitintensiven Fall endlicher Dichte anwenden.

4.4 Fehleranalyse

Bei der Berechnung der Fehler ist zu beachten, daß die durch die Monte Carlo Simulationen erzeugten Konfigurationen und die sich daraus ergebenen Observablen nicht voneinander unabhängig sind. Dabei ist die integrierte Korrelationszeit τ_{int} gerade ein Maß für die Korrelationen: Ist der statistische Fehler k unabhängiger Datensätze von der Ordnung $O(1/\sqrt{k})$, so vergrößert sich dieser durch die Korrelationen um dem Faktor $\sqrt{2\tau_{int}}$, ist also von der Ordnung $O(\sqrt{2\tau_{int}/k})$. Aufgrunddessen entsprechen die k korrelierten Datensätze gerade $k/2\tau_{int}$ unabhängigen Datensätzen.

Ein Verfahren, das insbesondere bei korrelierten und nicht direkt meßbaren Observablen der naiven Fehlerschätzung vorzuziehen ist, ist die *Bootstrap-Methode* oder, als Vereinfachung davon, die *Jackknife-Methode*. Diese ermöglicht es, die durch die Korrelationen auftretenden Verzerrungen zu eliminieren.

Liegen mehrere Datensätze vor, so kann man prinzipiell den Fehler einer hieraus zu messenden Observablen durch die sich ergegebene Variation bestimmen. Die Idee des Bootstrapverfahrens ist nun, aus dem einen vorhandenen Datensatz geschickt gewählte Unterdatensätze zu erzeugen, mit Hilfe dieser die Observablen zu messen und deren Variation zu betrachten. Beim Jacknife-Verfahren wird ein Datensatz der Länge N in b Blöcke der Länge $N_{Block} = N/b$ aufgeteilt. Hierbei ist darauf zu achten, daß die einzelnen Blöcke größer als die Autokorrelationszeit τ sind . Hierdurch wird erreicht, daß die b neuen Unterdatensätze der Länge $(b-1)N_{Block}$, die durch Weglassen jeweils eines Blockes erzeugt werden, als voneinander pseudo-unabhängig betrachtet werden können.

Das einfache Mittel aus N Messungen $X_1, \ldots, X_N$ ist durch

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^{N} \frac{X_i}{N}$$

gegeben. Das gleiche Mittel ohne den Beitrag der j-ten Messung wird durch

$$\bar{X}_{-j} = \frac{\sum_{i=1,i\neq j}^{N} X_i}{N-1} = \frac{(\sum_{i=1}^{N} X_i) - X_j}{N-1}$$

beschrieben. Kombiniert man beide Gleichungen, so ergibt sich gerade wieder die j-te Messung

$$X_j = N\bar{X} - (N-1)\bar{X}_{-j}.$$

Dieses Verfahren überträgt man nun analog auch auf die von den Messungen abhängigen Observablen:

$$\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_j = b\langle\ \mathcal{O}\ \rangle - (b-1)\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{-j} \tag{4.6}$$

Dabei ist $\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{-j}$ der sich unter Auslassen des j-ten *Jacknifeblockes* ergebene *partielle Erwatungswert* und $\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_j$ der sogenannte *j-te Pseudo-Jacknifewert* $\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_j$. Diese werden, obwohl in der Praxis doch mehr oder weniger korreliert, als unabhängig angenommen, sodaß deren einfaches Mittel gerade dem Jacknife-Erwartungswert entspricht,

$$\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{Jacknife} = \sum_{i=1}^{b} \frac{\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_i}{b}\ . \tag{4.7}$$

Entsprechend einfach wird auch die Varianz gebildet. Über die *Pseudo-Jacknifewerte* bewirkt dieses Verfahren, daß die durch die Korrelationen eigentlich entstehenden Verschiebungen in den Schätzungen, *Bias* genannt, unterdrückt werden. Daher wird dieses Verfahren auch als *Bias korrigierter Jacknife* bezeichnet. Die richtige Blockgröße bzw. die geeignete Blockanzahl ist dann gegeben, wenn der Jacknife-Erwartungswert bzw. die Varianz weder von der Anzahl noch von der Größe der Blöcke abhängt. Dies ist durch Variationen sicherzustellen.

In der Praxis werden aber auch oft die *partiellen Erwartungswerte* als *Pseudo-Jackknifewerte* benutzt. Dies ist insbesondere bei nichtlineraren bzw. nicht glatten Observablen der Fall, da obiges Verfahren dort versagt. Eine in dieser Situation bessere Methode ist der sogenannte *delete-d Jacknife*. Hierbei läßt man anstatt eines Blocks gleich d Blöcke aus. Insgesamt entstehen somit $\binom{b}{d}$ Pseudo-Jacknifewerte. Das Prinzip aber bleibt dasselbe. Es gilt

$$\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{Jacknife} = \sum_{i=1}^{b} \frac{\langle\ \mathcal{O}\ \rangle_i}{\binom{b}{d}}\ .$$

Dabei sollte $\sqrt{b} < d < b$ gewählt weden. Die Varianz schreibt sich

$$\sqrt{\frac{b-d}{d\binom{b}{d}} \sum (\mathcal{O}\ \rangle_i - \langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{Jacknife})^2}\ .$$

Dieses eigentlich bessere Verfahren hat sich in dieser Arbeit aber durch den ernormen Rechenaufwand insbesondere in Verbindung mit der *Multi--Histogramm Methode* verboten. Falls nötig, wurden Interpolations- und Smoothingverfahren kombiniert verwendet, um auch bei eigentlich diskreten Werten wie z.B. den Peaklagen, speziell bei Histogrammen der Observablen, noch sinnvolle Größen angeben zu können. Aus diesem Grund müssen auch die durch die *Multi-Histogramm Methode* erzeugten Werte genügend dicht beieinanderliegen, um Aussagen über z.B. den Fehler der kritischen Kopplung machen zu können.

4.5 Analyse der Phasenübergänge

Da aufgrund der endlichen Gittergrößen bei Simulationen nur endliche Größen auftreten, ist a priori nicht klar, ob im thermodynamischen Limes ein unstetiges Verhalten oder Divergenzen, Charakteristika für die Natur der Phasenübergänge, auftreten. Um nun Aussagen über das Verhalten des Systems bei unendlichem Volumen machen zu können, betrachtet man die Variation der Observablen bzw. deren Verteilung über verschiedene Gittergrößen und vergleicht die Entwicklung mit dem entsprechend der *Renomierungsgruppentheorie* zu erwartenden *Finite Size Scaling*. Allgemein werden Phasenübergänge durch die Ableitungen der Enthalpie bzw. des chemischen Potentials klassifiziert. Man spricht von einem Phasenübergang n-ter Ordnung, wenn die ersten $n-1$ Ableitungen der Enthalpie stetig sind, mindestens eine der n-ten Ableitungen nach den Zustandsvariablen jedoch unstetig ist.

4.5.1 Phasenübergänge erster Ordnung

Hierbei handelt es sich um Übergänge, die mit einem Entropiesprung bzw. einer latenten Wärme verbunden sind. Beide Phasen, die geordnete und die ungeordnete, sind durch die Oberflächenspannung voneinander getrennt. Die Korrelationslänge ξ bleibt am Phasenübergang endlich.

Betrachtet man Gittersimulationen, so folgt aus der *Renomierungsgruppentheorie*, daß ein Phasenübergang erster Ordnung durch mit dem Volumen skalierenden Suszeptibilitäten der Energie und der Magnetisierung charakterisiert wird. Die Differenz zwischen dem thermodynamischen Limes der kritischen Temperatur und der Temperatur auf dem Gitter, $|t_{c,V=\infty} - t_{c,V=L^3}|$, sowie die Korrelationslänge ξ verhalten sich umgekehrt proportional dem Volumen [27, 28]. Desweiteren kann man aber auch aus der Verteilung der inneren Energie die latente Wärme, die dem Abstand der Peaks entspricht, und der Verteilung des Ordnungsparameters die Oberflächenspannung, die sich aus dem Verhältnis der Peakhöhen zum dazwischen liegendem Minimum ergibt, bestimmen [29, 30, 28].

Betrachtet man ein System in einer reinen Phase, so ist der Ordnungsparameter, die Observable, um den Erwartungswert $\langle\ \mathcal{O}\ \rangle$ gaußverteilt. Ist

$$p_{i,L} = e^{-f_i L^d/T} \tag{4.8}$$

die Wahrscheinlichkeit, daß sich das System in der i-ten Phasen befindet, und f_i die freie Energie dieser Phase, so ist der Beitrag dieser Phase zur Verteilung der Observablen durch

$$P_{i,L}(\mathcal{O}) \propto p_{i,L} e^{-(\mathcal{O}-\langle\ \mathcal{O}\ \rangle)_{i,L}} \tag{4.9}$$

gegeben. Außer den homogenen Phasen trägt weiterhin noch die gemischte Phase zu der Wahrscheinlickeitsverteilung bei. Diese Phase ist anteilig dem Volumen der einzelnen, räumlich getrennten Phasen zusammengesetzt. Für die Observable gilt somit

$$\mathcal{O} = \langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{1,L} \frac{V_1}{V} + \langle\ \mathcal{O}\ \rangle_{2,L} \frac{V_2}{V} \quad . \tag{4.10}$$

Die freie Energie der gemischten Phase ergibt sich aus der freien Energie der beiden Domänen und deren Oberflächenspannung. Der Anteil der gemischten Phase, der Wahrscheinlickeitsverteilung $P_{m,L}(\mathcal{O})$, wird über die Wahrscheinlichkeit der gemischten Phase, die analog der homogenen Phase durch

$$p_{m,L} = e^{-(f_1 V_1 + f_2 V_2 + \sigma A)/T} \tag{4.11}$$

gegeben ist, bestimmt. Dabei bezeichnet σ die Oberflächenspannung und A die Größe der gesamten die Phasen separierenden Fläche.

Insgesamt ist die Verteilung des Ordnungsparameters also durch

$$P_L(\mathcal{O}) = P_{1,L}(\mathcal{O}) + P_{m,L}(\mathcal{O}) + P_{2,L}(\mathcal{O}) \tag{4.12}$$

gegeben.

Die Maxima der Verteilung werden gerade durch die homogenen Phasen hervorgerufen und entsprechen dem Extremum der $P_{i,L}(\mathcal{O})$. Das Minimum des Histogramms entsteht durch den Beitrag der Verteilung der gemischten Phase $P_{m,L}(\mathcal{O})$.

Geht man von gleichhohen Maxima am Phasenübergangspunkt aus, was insbesondere beim 3-dimensionalen Pottsmodell in sehr guter Näherung gleichen Anteilen der Phasen entspricht [31], und betrachtet man ein kubisches

System mit periodischen Randbedingungen, dessen freie Energie der gemischten Phase gerade durch zwei zu den Kanten parallelen Trennflächen minimiert wird, also $A = 2L^2$, so berechnet sich die Oberflächenspannung gemäß

$$\frac{P_L^{min}(\mathcal{O})}{P_L^{max}(\mathcal{O})^{V_1/V} P_L^{max}(\mathcal{O})^{V_2/V}} \propto \frac{e^{-(f_1 V_1 + f_2 V_2 + \sigma A)/T}}{e^{-f_1 V/T^{V_1/V}} e^{-f_2 V/T^{V_2/V}}} \tag{4.13}$$

durch

$$\ln \frac{P_L^{min}(\mathcal{O})}{P_L^{max}(\mathcal{O})} = Konstante - 2\sigma L^2/T \quad . \tag{4.14}$$

Den thermodynamischen Limes der Oberflächenspannung bzw. von σ/T erhält man also durch einen Fit von $-\frac{1}{2} \ln \frac{P_L^{min}(\mathcal{O})}{P_L^{max}(\mathcal{O})}$ gegen L^2.

4.5.2 Phasenübergänge zweiter Ordnung

Phasenübergänge zweiter Ordnung finden sich oft am Ende einer Phasenkoexistenzlinie, dem *kritischen Punkt* des Systems. Hier verschwinden sowohl die latente Wärme wie auch die die Phasen trennende Oberflächenspannung. Der Ordnungsparameter variiert stetig. Die Ableitung divergiert jedoch.

Ursächlich für das Verhalten des Systems am kritischen Punkt ist die hier divergierende Korrelationslänge ξ. Sie ist die für das System einzig relevante Längenskala und ursächlich für alle am kritischen Punkt auftretenden Divergenzen. Details der Wechselwirkungen werden somit irrelevant und viele physikalische Systeme zeigen ein ähnliches Verhalten. Dies ist die Aussage der *Universalitätshypothese*. Das Verhalten wird einzig durch die Reichweite der Wechselwirkung und die Dimension des Systems (und des Ordnungsparameters) bestimmt. Neben den *kritischen Exponenten*, die die Abhängigkeit bestimmter Variablen von der reduzierten Temperatur bzw. eines äußeren Feldes in der Nähe des kritischen Punktes quantifizieren, kann man Systeme durch die Verteilung der Observablen einer *Universalitätsklasse* zuordnen [32].

Abgesehen von dem hier durch die kritischen Indizes bestimmten *Finite Size Scaling* Verhalten, ist der Endpunkt durch universelle, vom Gitter unabhängige Größen, insbesondere der sich durch höhere Ableitungen der freien Energie in Verbindung mit der *Skalenhypothese* ergebenen sogenannten zweiten Bindercumulante [29][1]

$$B_{\bar{m}}^4 \equiv \frac{< \bar{m}^4 >}{(< \bar{m}^2 >)^2} \tag{4.15}$$

[1] hier wird die der Cumulante mehr entsprechende Definiton $B_{\bar{m}}^4 \equiv 1 - \frac{<\bar{m}^4>}{3(<\bar{m}^2>)^2}$ verwendet

gekennzeichnet. Dieses Kriterium hat den Vorteil, vernachlässigt man Korrekturen zum Finite-Size Scaling, daß keine Extrapolation zum thermodynamischen Limes erforderlich ist, um den kritischen Endpunkt zu bestimmen.

4.5.3 Crossover

Betrachtet man den sich in der Verlängerung der Phasenkoexistenzkurve im Anschluß an den Übergang zweiter Ordnung befindlichen Bereich, so kann man zwar immer noch Peaks in den Suszeptibilitäten feststellen, deren Höhen skalieren aber ab einer ausreichenden Gittergröße nicht mehr mit dem Volumen. Dieses Verhalten charakterisiert den Crossover-Bereich des Phasenraums.

4.6 Universalitätsklassen

Charakteristisch für die verschiedenen Universalitätsklassen sind die auf den Ordnungsparametern aufbauenden Verteilungen, im Ising-Modell also die Verteilung der aufgrund der $Z(2)$-Symmetrie im statistischen Sinne voneinander unabhängigen energie- bzw. magnetisierungsartigen Variablen. Will man jedoch die Verteilung von Energie und Magnetisierung im Pottsmodell mit endlicher Baryonenzahl oder endlichem chemischen Potential untersuchen, so hat man keine wirklichen, am Phasenübergang verschwindenden Ordnungsparameter. Aufgrund des äußeren Feldes wird die Symmetrie explizit gebrochen und die energie- und magnetisierungartigen Observablen mischen.

Um das Pottsmodell bei endlicher Dichte nun dennoch mit dem auf einem exaktem Ordnungsparameter beruhenden Verhalten des Isingmodells am kritischen Punkt vergleichen zu können, transformiert man, d.h. man entmischt sozusagen, die Energie und die Magnetisierung in Ising-ähnliche Observablen. Diese ergeben sich als Eigenvektoren der Korrelationsmatrix

$$F = \begin{bmatrix} <(\Delta\bar{m})^2> & <(\Delta\bar{m})(\Delta\bar{e})> \\ <(\Delta\bar{e})(\Delta\bar{m})> & <(\Delta\bar{e})^2> \end{bmatrix}. \tag{4.16}$$

Dabei gilt $\Delta\mathcal{O} \equiv \mathcal{O} - \langle\mathcal{O}\rangle$.

Die neuen Observablen ergeben sich also durch die die Korrelationsmatrix diagonalisierende Basistransformation D, also letztlich durch eine Drehung:

$$D^T \begin{bmatrix} \bar{m} \\ \bar{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{m} \\ \bar{e} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \bar{m}_r \\ \bar{e}_r \end{bmatrix} \tag{4.17}$$

Der Winkel α entspricht dabei gerade der Steigung der Phasenkoexistenzkurve direkt am kritischen Punkt.

Mit auf den Ursprung 0 zentrierten Mittelwerten und auf 1 normierten Varianzen ergeben die rotierten Werte eine universelle und für eine bestimmte Klasse typische Verteilung. Dieses qualitative Verfahren hat den Vorteil, daß es im Gegensatz zur Bestimmung der Universalitätsklasse über die kritischen Indizes nicht so sensitiv gegenüber Fehlern bei der Bestimmung des kritischen Punktes ist. Insgesamt wird viel weniger Simulationsaufwand benötigt. Wie man in Abbildung 4.1 erkennt, unterscheiden sich die Verteilungen der a priori in Frage kommenden Universalitätklassen, Ising, $O(2)$ und $O(4)$, recht deutlich voneinander.

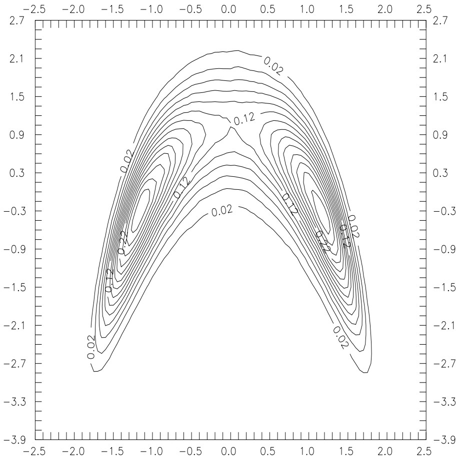
Einen quantitativen Hinweis auf die Universalitätsklasse (s. Rummukainen et al. [32]) bietet hier die zweite Bindercumulante der Fluktuationen der gedrehten, magnetisierungsartigen Observablen. Für

$$B^4_{r,\bar{m}} \equiv \frac{\langle \Delta\bar{m}_r^4 \rangle}{(\langle \Delta\bar{m}_r^2 \rangle)^2} \tag{4.18}$$

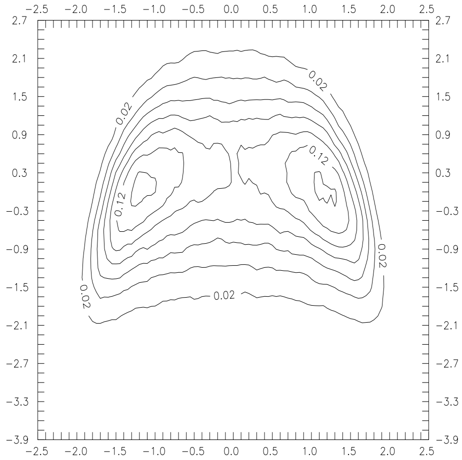
ergibt sich am kritischen Punkt je nach Universalitätsklasse ein bestimmter, ohne Berücksichtigung der Korrekturen zum Finite-Size Scaling, vom Gitter unabhängiger Wert. Überdies bieten die rotierten Werte eine weitere Möglichkeit, die Phasenkoexistenzkurve zu bestimmen. Die dritte Bindercumulante der Fluktuationen des Ordnungsparameters,

$$B^3_{r,\bar{m}} \equiv \frac{\langle (\Delta\bar{m}_r)^3 \rangle}{\langle (\Delta\bar{m}_r)^2 \rangle^{\frac{3}{2}}} \tag{4.19}$$

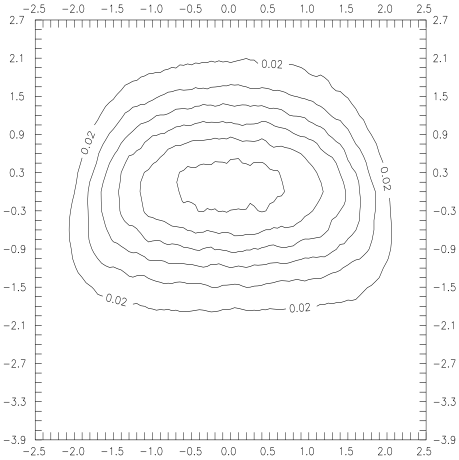
gibt gerade die Symmetrie der Verteilung an. Verschwindet sie, so ist das *Equal-Weight*-Kriterium erfüllt und man befindet sich genau am Phasenübergangspunkt.



(a) Isingmodell , V=58^3



(b) $O(2)$-Spinmodell, V=64^3



(c) $O(4)$-Spinmodell, V=64^3

Abbildung 4.1: *Verteilung der geglätteten und normierten Verteilungen der energie- und magnetisierungsartigen Observablen am kritischen Endpunkt, der Ising-, $O(2)$- und $O(4)$- Universalitätsklassen. Auf der horizontalen Achse ist $\Delta\bar{m}$, auf der vertikalen Achse ist $\Delta\bar{e}$ aufgetragen [32].*

Kapitel 5

Simulationsergebnisse

Nachdem kurz der in den verschiedenen Ansätzen untersuchte Bereich der Quarkzahl-Volumenverhältnisse bzw. der "Statischen Konstante" vorgestellt und die jeweils verwendeten Gittergrößen angegeben wurden, 5.1, wird in den Abschnitten 5.2 und 5.3 die Entwicklung des Erwartunsgswertes des Vorzeichens in Abhängigkeit des Quarkzahl-Volumenverhältnisses oder der "Statischen Konstante" und dem Volumen anhand der Simulationsergebnisse diskutiert.

Danach werden im Abschnitt 5.4 zunächst die mittels des Pottsmodells hinsichtlich des kanonischen Übergangs gewonnen Resultate betrachtet und in Bezug zum Verhalten der QCD bei endlicher Dichte gesetzt. Weiterhin werden für den kanonischen Ansatz die Abhängigkeiten der kritischen Kopplung β_c und der kritischen Extremalwerte der Suszeptibilitäten von dem Quarkzahl-Volumenverhältnis vorgestellt. Ferner wird auch die Variation der Extremalwerte der Suszeptibilitäten mit dem Volumen bei ungefähr gleichem Quarkzahl-Volumenverhältnis betrachtet. Einen detaillierten Überblick, auch in Hinblick auf das Vorzeichenproblem, geben schließlich Plots für vier ausgewählte Quarkzahl-Volumenverhältnisse.

Simulationsergebnisse zum Übergang im Großkanonischen werden im Abschnitt 5.5 vorgestellt. Exemplarisch werden zunächst Plots der Observablen für zwei verschiedene Gittergrößen gezeigt, insbesondere wird die Abhängigkeit des Erwartungswertes des Quarkzahl-Volumenverhältnis von der Kopplung β hervorgehoben. Danach folgt eine Untersuchung des Finite-Size-Scaling Verhaltens der kritischen Kopplung β_c und der kritischen Extremalwerte der Suszeptibilitäten und die Bestimmung des Schnittpunktes der 2. Bindercumulante der isingähnlichen, magnetisierungsartigen Observablen, aufgrund derer ein Bereich der "Statischen Konstante", in dem sich der kritische Endpunkt befindet, festgelegt werden kann und sich Hinweise auf die Ising-Universalitätklasse ergeben. Zum Schluß wird zum Vergleich mit den kanonischen Simulationen das Quarkzahl-Volumenverhältnis am Phasenübergangspunkt bestimmt und im Detail dessen Volumenabhängigkeit um den kritischen Endpunkt aufgezeigt.

5.1 Simulationsbereich

Ein wichtiger Aspekt dieser Arbeit ist die Untersuchung des Vorzeichenproblems. A priori war nicht bekannt, wie stark die gerade bei großen Gittern auftretenden negativen Beiträge zum Erwartungswert des Vorzeichens die Untersuchungen einschränken würden. Daher wurde nicht nur im Bereich des Phasenüberganges simuliert, sondern, insbesondere bei kleineren Volumina, auch im Bereich größerer Dichten bzw. Kopplungen, um Aussagen über den mit dem gewählten Ansatz zu untersuchenden Bereich machen zu können. Letztlich waren hierdurch die Untersuchungen auf bestimmte Verhältnisse von Volumen und Dichten bzw. Kopplungen beschränkt und die Möglichkeiten, das *Finite Size Scaling* Verhalten zu betrachten, eingeschränkt vorhanden. Teilweise konnte die Variation nicht über viele Volumina untersucht werden und es ist somit nicht immer klar, ob im *asymptotischen Volumenbereich* simuliert wurde. Im kanonischen Ansatz sind die Möglichkeiten, Volumeneffekte bei ähnlichem Quarkzahl-Volumenverhältnis zu analysieren, weiterhin, wie schon beschrieben, dadurch begrenzt, daß die Quarkzahl ein Vielfaches von drei sein muß.

Insgesamt wurden so im kanonischen Ansatz Gitter von 8^3 bis 63^3 mit Quarkzahldichten bis zu 0.09375 $[B/V]$ (s. Tabelle 5.1) und bis zu 96 Quarks untersucht. Da in dieser Formulierung auch im thermodynamischen Limes keine Singularitäten zu erwarten sind und das Verhalten im wesentlichen rein dichteabhängig sein sollte, war anfänglich auch nicht klar, wie stark und welcher Art Volumeneffekte sind bzw. wann das asymptotische Verhalten einsetzt.

ungefähre	tatsächliche Dichte bei L											
Dichte	8	10	12	14	16	20	30	35	40	44	50	63
0	0	0	0	0	0				0		0	
2.4											2.4	2.4
7.2								6.997		7.044	7.2	
9.4									9.375			
11.1							11.11					
300		300	347	328	293	300						
600		600										
1200	1172	1200	1215	1203	1171							
2344	2344				2343							
9375	9375											

Tabelle 5.1: *Quarkzahl-Volumenverhältnisse* $[10^{-5}B/V]$

In erster Näherung wurde die primäre Dichteabhängigkeit durch die Simulationen bestätigt. Dennoch erkennt man mit zunehmender Gittergröße sich etwas stärker ausprägende Peaks. Die Simulationen zeigen, daß es besonders für kleinere Dichten immer wichtiger wird, zu größeren Gittern überzugehen, um in den asymptotischen Volumenbereich zu gelangen. Letztlich wird es hier immer schwieriger, durch die Variation des Volumens Aussagen über die Struktur des Phasenüberganges zu machen. Insofern wurde, soweit machbar, die *Finite Size Scaling* Analyse im großkanonischen Ansatz durchgeführt und, zum Vergleich mit den kanonischen Simulationen, die Baryonendichte am Phasenübergangspunkt bestimmt.

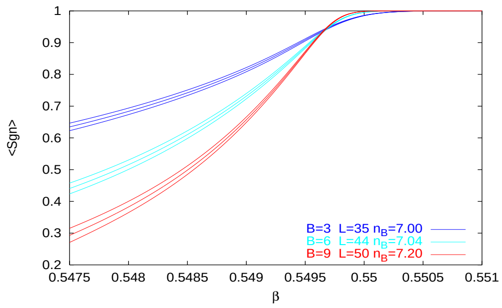
Im großkanonischen Ansatz wurden Gitter von 16^3 bis 50^3 bei Kopplungen C von bis zu $1 * 10^{-3}$ betrachtet (s. Tabelle 5.2). Es stellte sich heraus (im Einklang mit Untersuchungen von Jahnke et al. bei verschwindender Dichte [31]), daß man auch im Fall endlicher Bayonenzahl unter *Finite Size Scaling* Aspekten möglichst Gitter ab 30^3 betrachten sollte.

Nach anfänglicher Analyse der Korrelationszeiten wurde letztlich bei jedem fünften Gitter-Update gemessen. Da die Umgewichtung mit Hilfe der Multihistogramm-Methode nur in Bezug auf β möglich war, wurde teilweise mit recht hohen Statistiken gearbeit, bis zu 10^6 Messungen pro β-Wert, um z.B. relativ zuverlässige Werte zur Interpolation zwischen verschiedenen "Statischen Konstanten" zur Verfügung zu haben oder relativ kleine Volumeneffekte im Kanonischen von statistischen Fluktuationen abzuheben. Gleiches gilt auch für Bereiche besonders starker Fluktuationen im Vorzeichen. Typischerweise wurden 200000 Werte zu einem β-Wert analysiert.

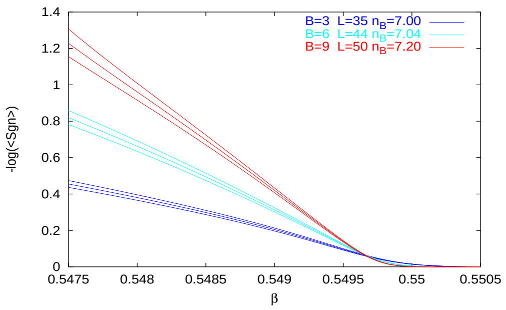
C	Gitter					
0					40	50
$1 * 10^{-5}$				30	40	50
$3 * 10^{-5}$				30	40	50
$5 * 10^{-5}$				30	40	50
$1 * 10^{-4}$	16	20	24	30	40	50
$2 * 10^{-4}$	16					
$3 * 10^{-4}$	16					
$5 * 10^{-4}$	16					
$1 * 10^{-3}$	16					

Tabelle 5.2: *Betrachtete Kopplungen C*

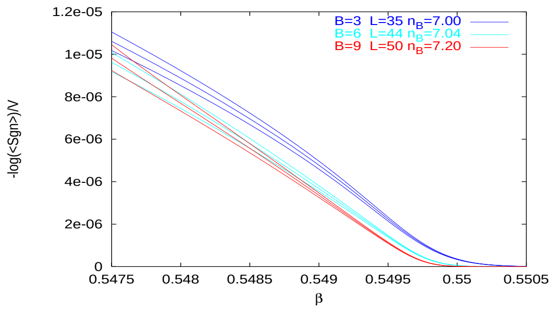
5.2 Das Vorzeichen in kanonischen Simulationen



(a) linearer Plot



(b) logarithmischer Plot



(c) volumennormierter, logarithmischer Plot

Abbildung 5.1: *Erwartungswert von sgn* $\mathrm{Re}(\hat{f}_B)$ *bei unterschiedlichen Volumina, kanonisch, Quarkzahl-Volumenverhältnis* $B/V = 7 * 10^{-5}$

Betrachtet man das Vorzeichen im Kanonischen bei verschiedenen Volumina aber gleichen Dichten (s. Abb. 5.1), so erkennt man recht deutlich den mit der Kopplung β verbunden exponentiellen Abfall. Die verwendeten Gitter, 35^3, 44^3 und 50^3, entsprechen einem Volumen von 42875, 85184 und 125000. Der logarithmische Plot (Abb. 5.1.b) bestätigt somit durch die Äquidistanz der Graphen in recht guter Weise die exponentielle Abhängigkeit des Erwartungswertes des Vorzeichens vom Volumen. Noch deutlicher wird dies allerdings in der volumennormierten Darstellung (Abb. 5.1.c).

Darüberhinaus sieht man, daß die negativen Beiträge bei kleineren Volumina schon bei größeren Kopplungen einsetzen. Vergleicht man das Verhalten des Vorzeichen bei gleichem Volumen aber unterschiedlicher Dichte (s. Abb. 5.2), so wird der exponentielle Abfall erwartungsgemäß mit abnehmender

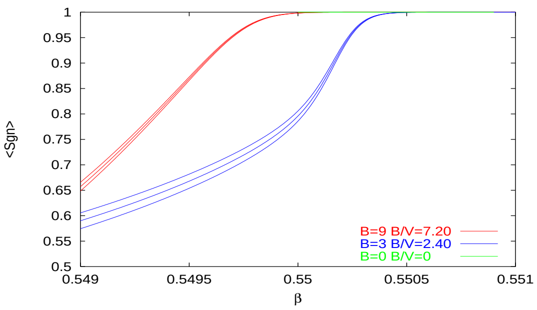


Abbildung 5.2:
Erwartungswert von sgn $\mathrm{Re}(\hat{f}_B)$, *kanonisch, Quarkzahl-Volumenverhältnis* $B/V = 7.2,\ 2.4,\ 0 * 10^{-5}$, $L = 50$.

Baryonenzahl schwächer, solange, bis bei verschwindender Dichte keine negativen Beiträge mehr vorkommen.

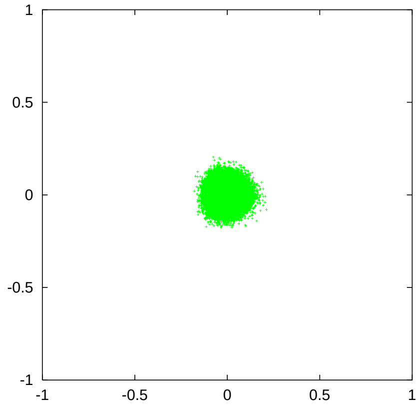
Weiteren Einblick in die Struktur positiver und negativer Anteile bietet der nach Vorzeichen getrennte Plot von $\hat{f}_B$, letzlich also der Magnetisierung, in die komplexe Ebene.

Betrachtet man zunächst ein System bei verschwindender Dichte (s. Abb. 5.3), so sieht man bei schwacher Kopplung eine strukturlose, um den Ursprung gleichverteilte Magnetisierung. Mit wachsender Kopplung tritt dann im Bereich des Phasenüberganges die $Z(3)$-Struktur deutlich hervor, bis sich das System bei noch stärkerer Kopplung quasi vollständig in der Spitze in einem der drei Sektoren befindet.

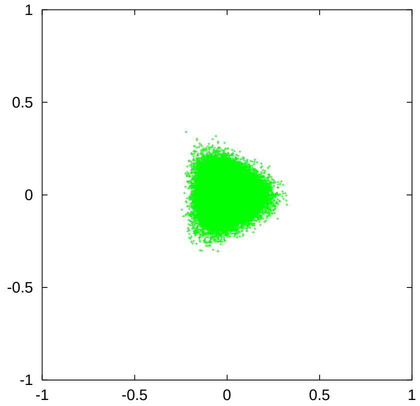
Vergleicht man dieses Verhalten mit dem eines Systems bei endlicher Dichte, so erkennt man qualitativ ein ähnliches Verhalten. Abgesehen von der durch die mit der endlichen Dichte einhergehenden Verschiebung des Übergangs zu niedrigeren Kopplungen, wird in Abbildung 5.4 allerdings noch eine durch die Proportionalität von $\hat{f}_B$ zum Phasenfaktor $e^{i\varphi B}$ hervorgerufenene, die dichtelose Verteilung überlagernde Struktur der Verteilung des Vorzeichens deutlich,

$$\hat{f}_B \propto \bar{m}^B \propto |\bar{m}| e^{i\varphi B} \ . \tag{5.1}$$

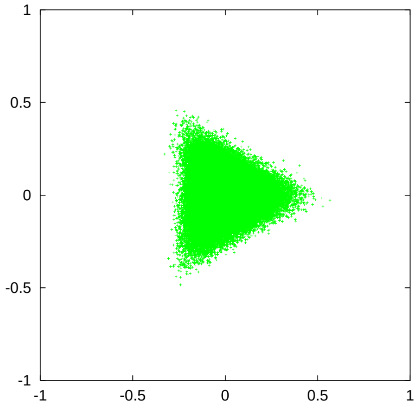
Dabei ist φ der Winkel in der komplexen Ebene. Entsprechend $B = 6$ ergeben sich somit je sechs Bereiche negativer und postiver Beiträge. Mit bei höheren Kopplungen verschwindenden, negativen Anteilen werden die zugehörigen Bereiche negativen Vorzeichens immer kleiner, bis sich die Plots verschwindender und endlicher Dichte genügend weit oberhalb des Überganges nicht mehr unterscheiden. Einen quantitativen Einblick auf die Anzahl der Beiträge dieses Systems entsprechend ihrem Vorzeichen geben die Plots der Histogramme in Abbildung 5.5, sie entsprechen den Plots in Abbildung 5.4. Der Übersichtlichkeit halber wurden die Sektoren der Gruppe $Z(3)$ auf den Sektor um die reelle Achse projiziert. Insbesondere ist die unterschiedliche Skalierung der Ordinate zu beachten.



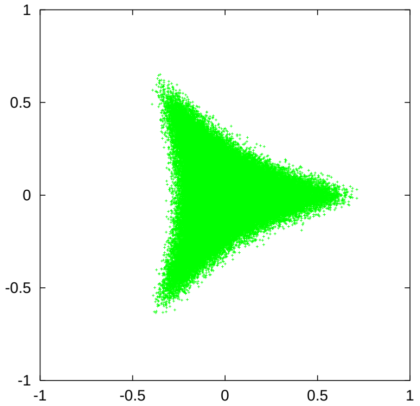
(a) $\beta = 0.3$



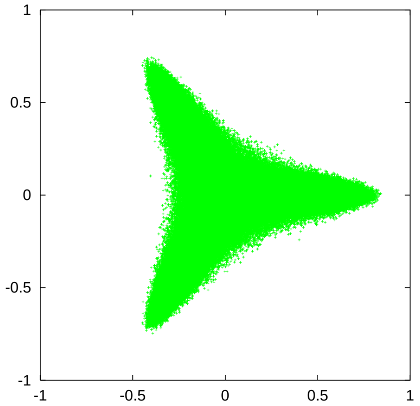
(b) $\beta = 0.45$



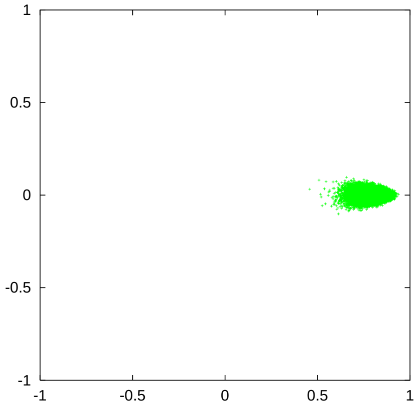
(c) $\beta = 0.5$



(d) $\beta = 0.53$

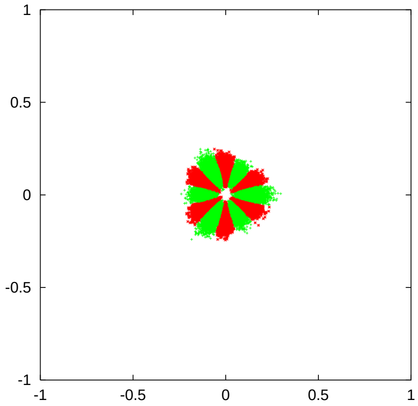


(e) $\beta = 0.55$

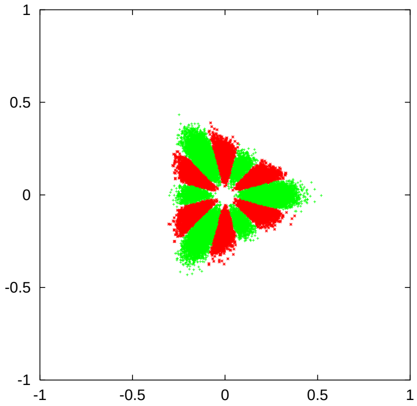


(f) $\beta = 0.6$

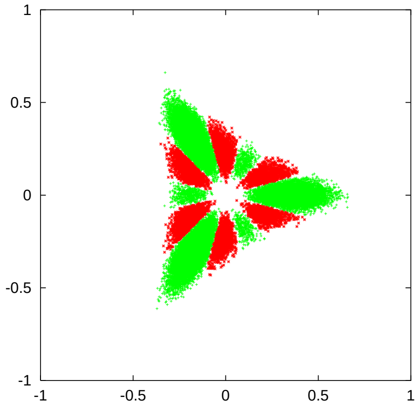
Abbildung 5.3: *Plots der komplexen Magnetisierung bei verschwindender Dichte (mit rein positiven Beiträgen zum Erwartungswert des Vorzeichens von $\hat{f}_B$). Auf der horizontalen Aches ist* $\mathrm{Re}(\bar{\mathrm{m}})$*, auf der vertikalen* $\mathrm{Im}(\bar{\mathrm{m}})$ *aufgetragen.* $B = 0, L = 8$



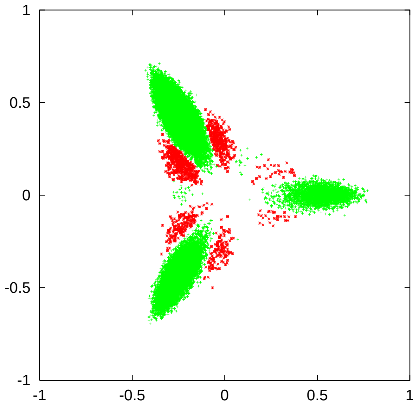
(a) $\beta = 0.3$



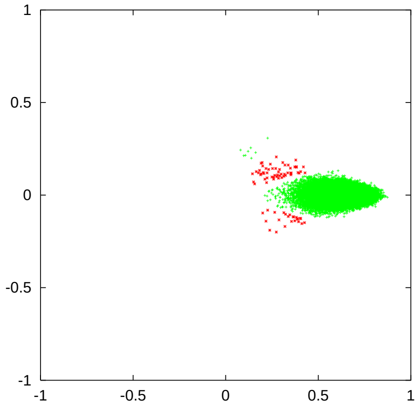
(b) $\beta = 0.45$



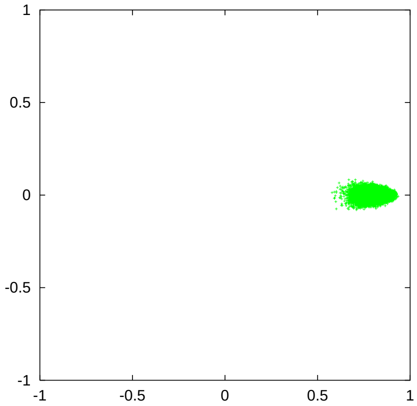
(c) $\beta = 0.5$



(d) $\beta = 0.53$

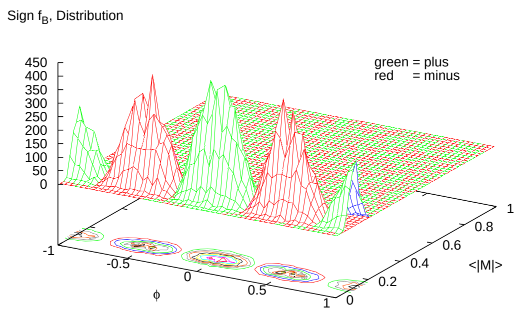


(e) $\beta = 0.55$

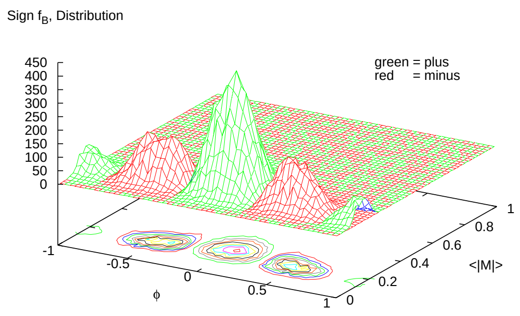


(f) $\beta = 0.6$

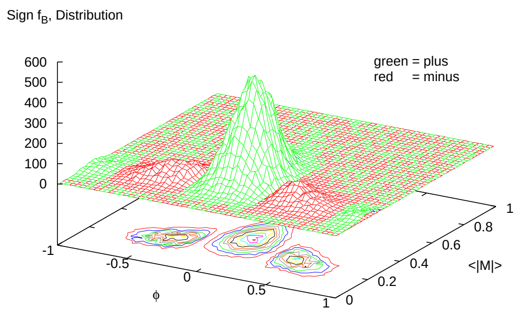
Abbildung 5.4: *Plots der komplexen Magnetisierung bei endlicher Dichte im Kanonischen. Die positiven Beiträge zum Erwartungswert des Vorzeichens von* $\hat{f}_B$ *sind grün, die negativen Beiträge sind rot eingezeichnet. Auf der horizontalen Aches ist* $\mathrm{Re}(\bar{\mathrm{m}})$, *auf der vertikalen* $\mathrm{Im}(\bar{\mathrm{m}})$ *aufgetragen.* $B = 6, L = 8, B/V = 1172 * 10^{-5}$



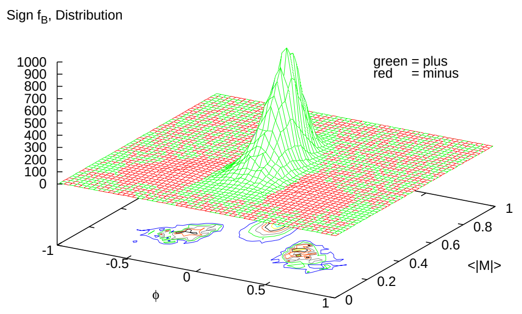
(a) $\beta = 0.3$



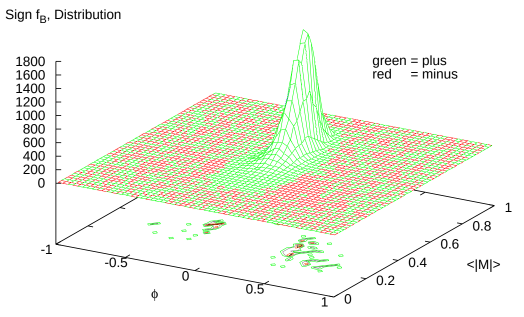
(b) $\beta = 0.45$



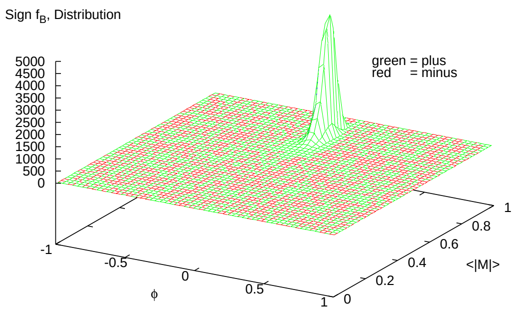
(c) $\beta = 0.5$



(d) $\beta = 0.53$

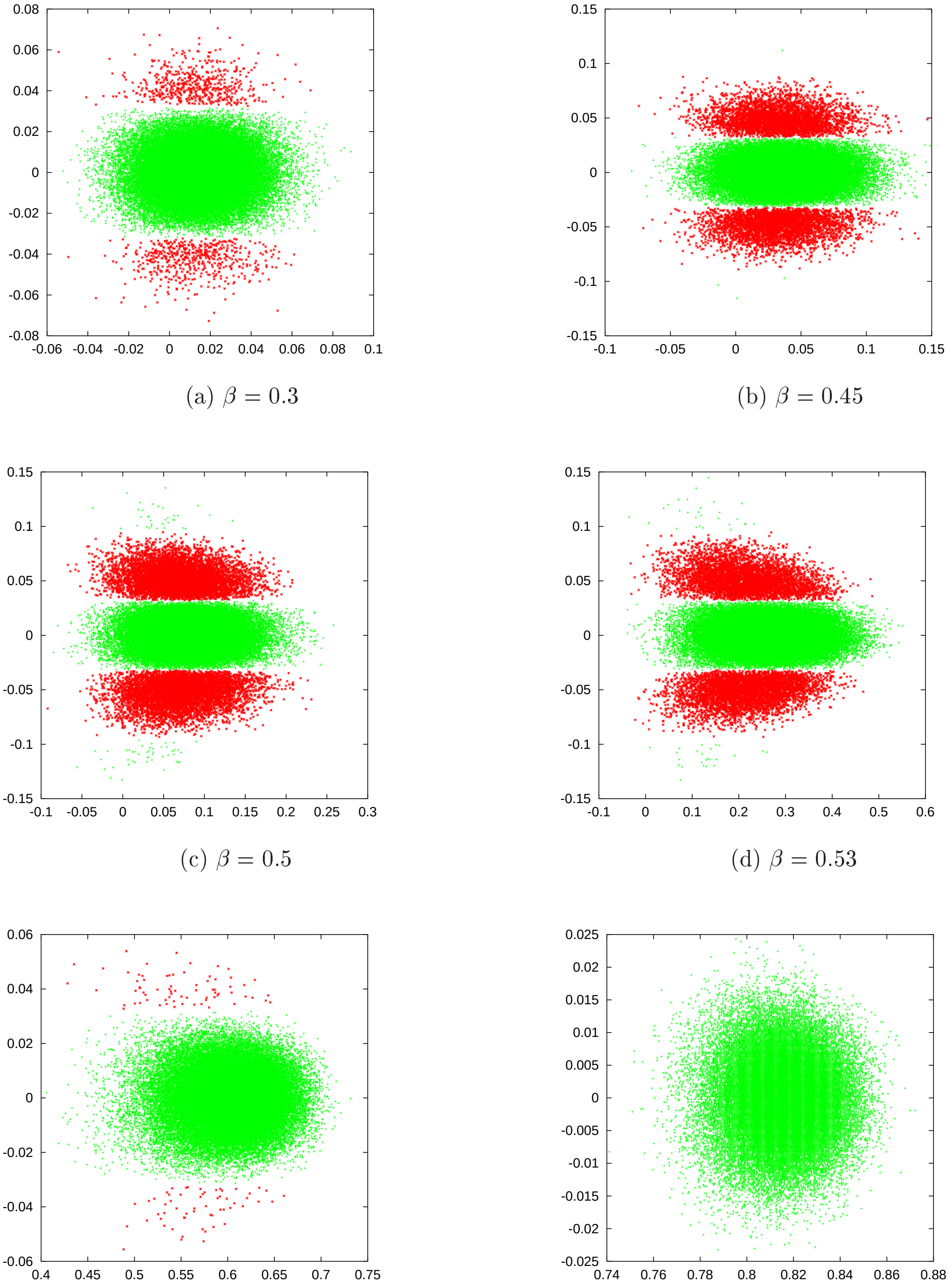


(e) $\beta = 0.55$



(f) $\beta = 0.6$

Abbildung 5.5: *Histogramme der Projektion der Magnetisierung bei endlicher Dichte im Kanonischen in den 0-Sektor der Z(3) ($+/-60°$ um die reelle Achse), aufgetragen in Abhängigkeit von dem Winkel ϕ (in Einheiten von $1/3\pi$) in der komplexe Ebene und dem Betrag. Die positiven Beiträge zum Erwartungswert des Vorzeichens von $\hat{f}_B$ sind grün, die negativen Beiträge sind rot eingezeichnet.* $B = 6, L = 8, B/V = 1172 * 10^{-5}$



(a) $\beta = 0.3$

(b) $\beta = 0.45$

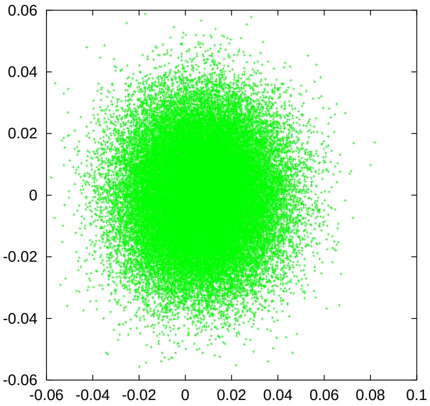
(c) $\beta = 0.5$

(d) $\beta = 0.53$

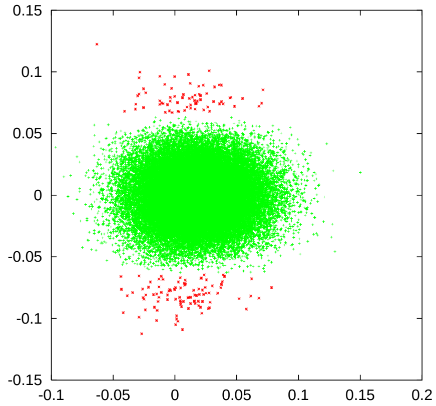
(e) $\beta = 0.55$

(f) $\beta = 0.6$

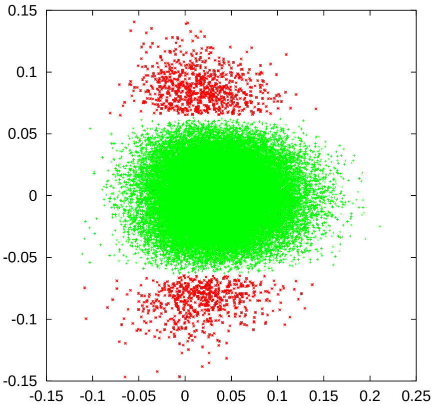
Abbildung 5.6: *Plots der komplexen Magnetisierung bei endlicher Dichte im Großkanonischen. Die positiven Beiträge zum Erwartungswert des Vorzeichens von* $\hat{f}_C$ *sind grün, die negativen Beiträge sind rot eingezeichnet. Auf der horizontalen Aches ist* $\mathrm{Re}(\bar{\mathrm{m}})$, *auf der vertikalen* $\mathrm{Im}(\bar{\mathrm{m}})$ *aufgetragen.* $C = 0.001, L = 16$



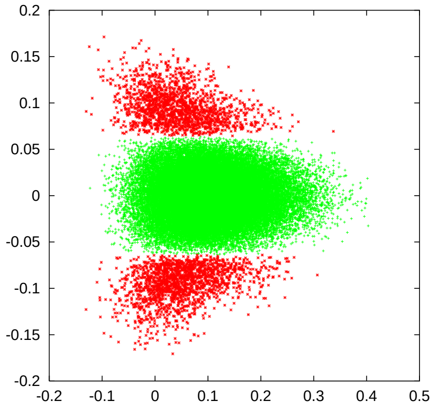
(a) $\beta = 0.3$



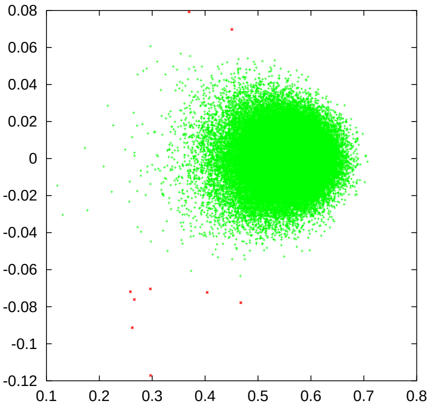
(b) $\beta = 0.45$



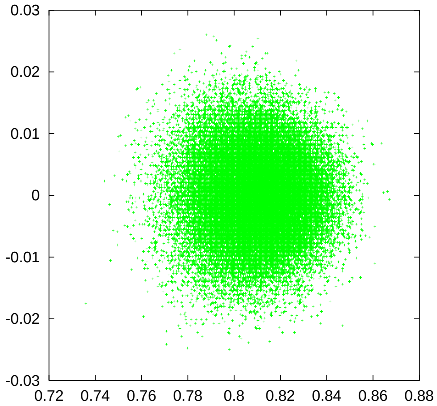
(c) $\beta = 0.5$



(d) $\beta = 0.53$



(e) $\beta = 0.55$



(f) $\beta = 0.6$

Abbildung 5.7: *Plots der komplexen Magnetisierung bei endlicher Dichte im Großkanonischen. Die positiven Beiträge zum Erwartungswert des Vorzeichens von $\hat{f}_C$ sind grün, die negativen Beiträge sind rot eingezeichnet. Auf der horizontalen Aches ist* $\mathrm{Re}(\bar{\mathrm{m}})$, *auf der vertikalen* $\mathrm{Im}(\bar{\mathrm{m}})$ *aufgetragen.* $C = 0.0005, L = 16$

5.3 Das Vorzeichen in großkanonischen Simulationen

Ein Blick auf die Entwicklung des Vorzeichens, also des Erwartungswertes von *sgn* $\mathrm{Re}(\hat{f}_C)$, bei vorgegebener "Statischer Konstante" C in verschiedenen großen Systemen (s. Abb. 5.8) oder bei vorgegebenen Volumen und varierender "Statischer Konstante" C (s. Abb. 5.9) läßt sofort zwei Dinge deutlich werden: Erstens ist das qualitative Verhalten im Vergleich zur kanonischen Simulation ein anderes. Strebt bei letzterem der Erwartungswert des Vorzeichens mit abnehmender Kopplung gegen null, so verschwinden im Gegensatz hierzu in der großkanonischen Simulation die negativen Beiträge bei genügend schwacher Kopplung vollständig. Besonders im Bereich der Kopplung leicht unterhalb des Phasenüberganges bildet sich ein mit wachsendem Volumen tiefer werdender Dip des Erwartungswertes des Vorzeichens aus.

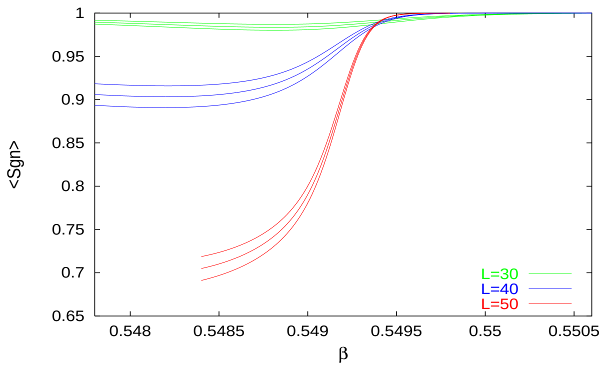


Abbildung 5.8: *Erwartungswert von sgn* $\mathrm{Re}(\hat{f}_C)$ *bei unterschiedlichen Volumina, großkanonisch, "Statische Konstante"* $C = 0.00005$

Der Grund hierfür ist wie im Kanonischen leicht mit Hilfe der Definition von $\hat{f}_C$,

$$\hat{f}_C \equiv (\cos(12CV\mathrm{Im}(\bar{m})) + i\sin(12CV\mathrm{Im}(\bar{m})))e^{+12CV(\mathrm{Re}(\bar{m}))}\ , \qquad (5.2)$$

in Verbindung mit den Plots der Magnetisierung ersichtlich (Abb. 5.6, 5.7). Aus der Definition wird deutlich, daß das Vorzeichen mit der Periode des Kosinus in Abhängigkeit vom Imaginärteil der Magnetisierung wechselt. Ist dieser genügend klein, verschwinden auch die negativen Anteile zum Erwartungswert des Vorzeichens. Dies ist genau dann der Fall, falls der Betrag der Magnetisierung bei genügend schwacher Kopplung insgesamt gegen null geht oder falls bei ausreichend starker Kopplung die Magnetisierung stark um die reelle Achse zentriert ist. Wie man allerdings auch schon im Kanonischen gesehen hat, zeigt sich zweitens ein für das kleinste Gitter zu größerer Kopplung verschobenes Einsetzen der negativen Beiträge. Im Gegensatz zum Kanonischen, in dem sich die exponentielle Volumenabhängigkeit im wesentlichen für alle Volumina über große Bereich der Kopplung relativ gut bestätigt, ist dies hier nur für die beiden größten Gitter ($L = 40,\ 50$) im Bereich um den Phasenübergang der Fall. Betrachtet man die Abhängigkeit des Vorzeichens bei gleichem Volumen von der "Statischen Konstante" (siehe Abb 5.9), so erkennt man deutlich, wie der Dip des Erwartungswertes des Vorzeichens mit größer werdendem C immer tiefer und die Ausdehnung in Richtung kleinerer Kopplung zunimmt. Weiterhin verschiebt sich das Dipminimum sowie das Vorkommen negativer Anteile mit kleiner werdender "Statischer Konstante", mit wachsendem kritischem β_c einhergehend, zu größerer Kopplung.

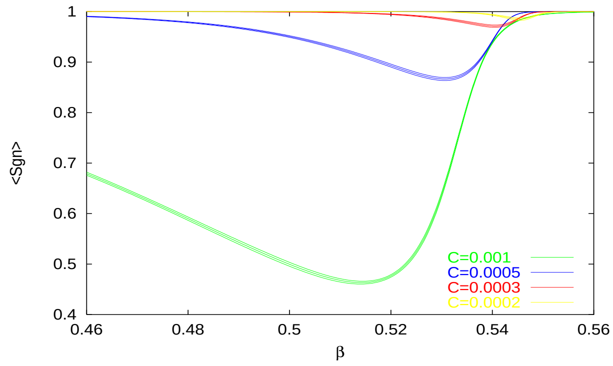


Abbildung 5.9: *Erwartungswert von sgn* $\mathrm{Re}(\hat{f}_C)$ *bei unterschiedlichen "Statischen Konstanten", großkanonisch,* $L = 16$

Letzlich hat die Zunahme der negativen Anteile mit wachsendem Volumen oder wachsender "Statischer Konstante" den gleichen formalen Grund: Beides tritt als Vorfaktor zum Imaginärteil der Magnetisierung im Kosinus auf. Eine größere "Statische Konstante" und bzw. oder ein größeres Volumen führt somit zwangsläufig zu einer kürzeren Periode und somit zu mehr negativen Beiträgen. Dies wird auch quantitiv recht gut durch den Vergleich der Abbildungen 5.6 und 5.7 bestätigt, die durch Simulationen bei gleichem Volumen aber doppelt so großer "Statischer Konstante" entstanden sind. Im wesentlichen unterscheiden sich die Abbildungen durch den theoretisch zu erwartenden Faktor 2 in der Ausdehnung der durch die Vorzeichen gekennzeichneten Bereiche. Die Verteilung der Magnetisierung dagegen ist recht ähnlich.

Hier werden die Grenzen des Vorzeichenproblems klar. Ist das Produkt aus endlicher "Statischer Konstante" und Volumen genügend klein, so treten gar keine negativen Beiträge mehr auf ($|\mathrm{Im}(\bar{m})|) \leq 1$). Andererseits sieht man hier aber auch, daß mit wachsendem Volumen immer mehr Perioden in den durch die imaginäre Magnetisierung gekennzeichneten Bereich passen und sich die positven und negativen Anteile gegenseitig auslöschen. Dies ist der Grund, daß die Möglichkeiten des *Finite Size Scaling* begrenzt sind. Ein

Übergang zum thermodynamischen Limes ist somit für gewisse Bereich der Kopplung auch theoretisch ausgeschlossen.

Physikalisch ist das qualitative Verhalten leicht mit dem des kanonischen Formalismus in Zusammenhang zu bringen. Mit abnehmender Kopplung schwindet im Großkanonischen die Dichte (s. Abb. 5.25). Letztlich sind somit in beiden Formalismen bei hoher Kopplung und bzw. oder geringer Dichte die durch die negativen Vorzeichen bedingten Auslöschungen unbedeutend. Im Bereich der kritischen Kopplung jedoch ist je nach "Statischer Konstante" noch eine möglicherweise zu einem kleinen Erwartungswert des Vorzeichens führende Dichte vorhanden. Insofern werden bei kleinen Kopplungen aber dennoch genügend großer Dichte in beiden Ansätzen die Auslöschungen gleichsam relevant.

Insbesondere in Abbildung 5.7.d, in der Nähe des Phasenüberganges, ist weiterhin auch recht deutlich die $Z(3)$-Phasenstruktur zu erkennen. Bei doppelter "Statischer Konstante" ist sie dagegen schon fast vollständig verschwunden.

5.4 Übergang im Kanonischen

Betrachtet man zunächst die Situation in der QCD bei einer festen Anzahl statischer Quarks und variiert die Kopplung β, so ändert man gleichfalls den Gitter Cut-Off und somit die eigentliche Quarkdichte n_B. Letztlich bewegt man sich auf einer schrägen Bahn durch den Phasenraum (Abb. 5.10). Dieses Verhalten wird durch die Simulationen der QCD bei endlicher Baryondichte von O. Kaczmarek et al. [33] bestätigt. Vergleicht man die Resultate mit den entsprechenden, mit Hilfe des Pottsmodels erzeugten Ergebnissen, so stellt man eine recht deutliche qualitative Übereinstimmung fest. Genau wie in der QCD erkennt man den Sprung in der dem Polyakov-Loop entsprechenden Magnetisierung für $B = 0$. Weiterhin verschwindet die Magnetisierung $\langle|\bar{m}|\rangle$ in diesem Fall für unendliches Volumen vollständig unterhalb der kritischen Kopplung und erweist sich tatsächlich als ein echter Ordnungsparameter.

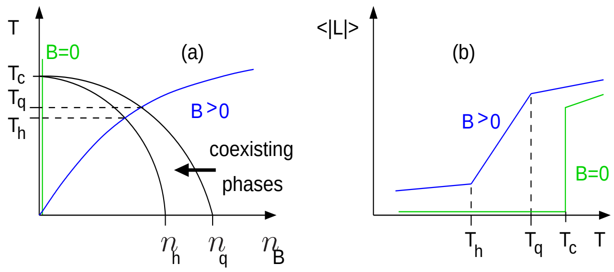


Abbildung 5.10: *Schematischer Plot des Phasendiagramms der QCD (a) und des zu erwartenden Verhaltens des Polyakov Loops (b) für einen Phasenübergang erster Ordnung.[17]*

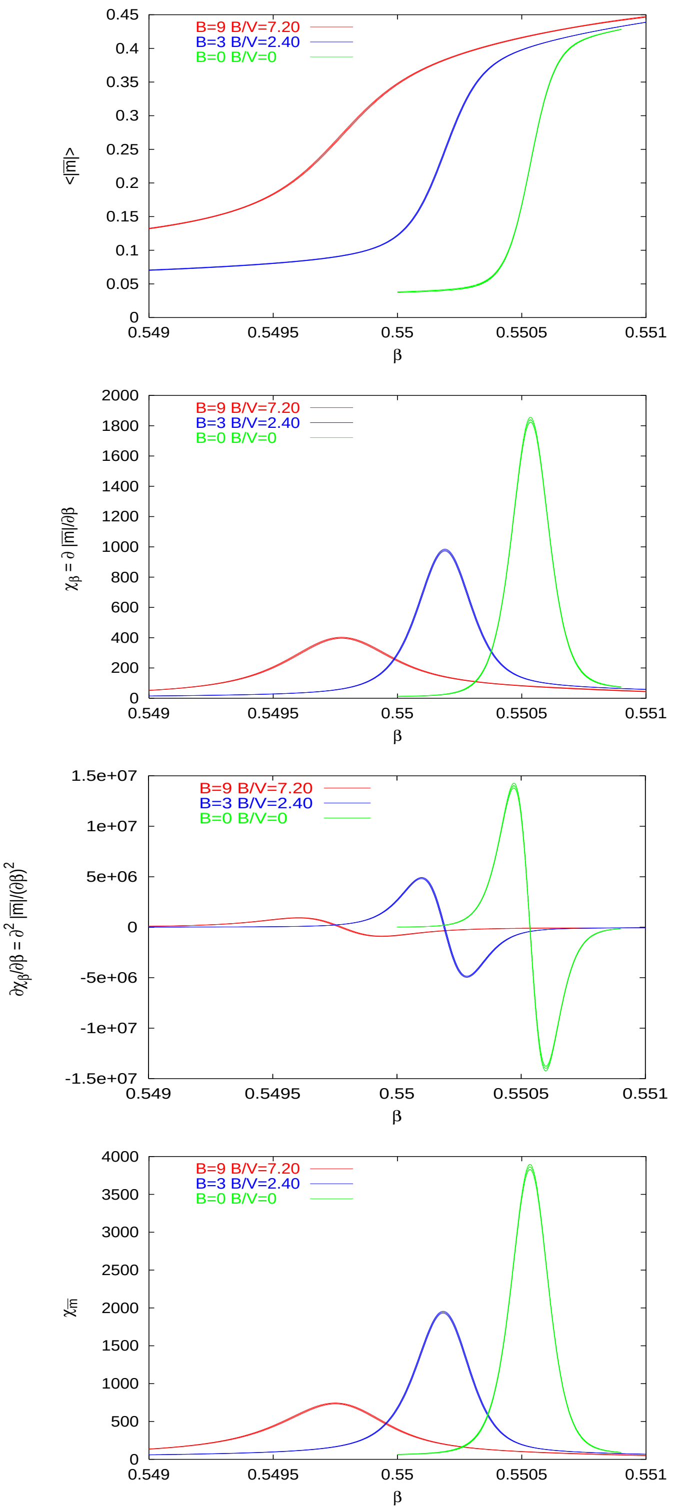


Abbildung 5.11: *Verhalten der Magnetisierung im Kanonischen bei unterschiedlichen Quarkzahlen aber gleichem Volumen,* $B/V = 0,\ 2.4,\ 7.2\ * 10^{-5},\ L = 50$

Sobald man jedoch eine endliche Teilchenzahl einführt, bleibt die Magnetisierung $\langle|\bar{m}|\rangle$ auch in der ungeordneten Phase endlich und sowohl der für die QCD beschriebene Shift wie auch die Verbreiterung des Überganges setzen ein.

Als ein Maß für die Stärke des Überganges bietet sich nun die 1. Ableitung der Magnetisierung nach β, also die einführend beschriebene gemischte Suszeptibilität χ_β, sowie die 2. Ableitung der Magnetisierung nach β,

$$\partial\chi_\beta/\partial\beta = \langle\partial^2|\bar{m}|/(\partial\beta)^2\rangle$$

zur Quantifizierung der Breite an.

Der in Bezug auf die Größe der Werte bei kleinem Quarkzahl-Volumenverhältnis stärkste Indikator für den Phasenübergang ist die nach dem Fluktuations-Dissipations Theorem bestimmte Suszeptibilität der Magnetisierung $\chi_{\bar{m}}$. In Abbildung 5.11 entspricht das Signal ungefähr dem doppelten der gemischten Suszeptibilität. Bei großem Quarkzahl-Volumenverhältnis ist allerdings die gemischte Suszeptibilität größer.

Betrachtet man die Energie, so ist die Verschiebung und Verbreiterung des Übergangs mit zunehmender Baryonenzahl zwar ebenfalls vorhanden, allerdings sind sie im Vergleich zur Magnetisierung weit schwächer ausgeprägt. Weiterhin verschwindet die Energie auch bei verschwindender Baryonenzahl nicht und ist somit schon a priori auch kein Ordnungsparameter.

Letztlich ist auch die spezifische Wärme $c_{\bar{e}}$ bei kleinem Quark-Volumenverhältnis gegenüber der Suszeptibilität der Magnetisierung ein ungefähr 20-fach schwächerer Indikator.

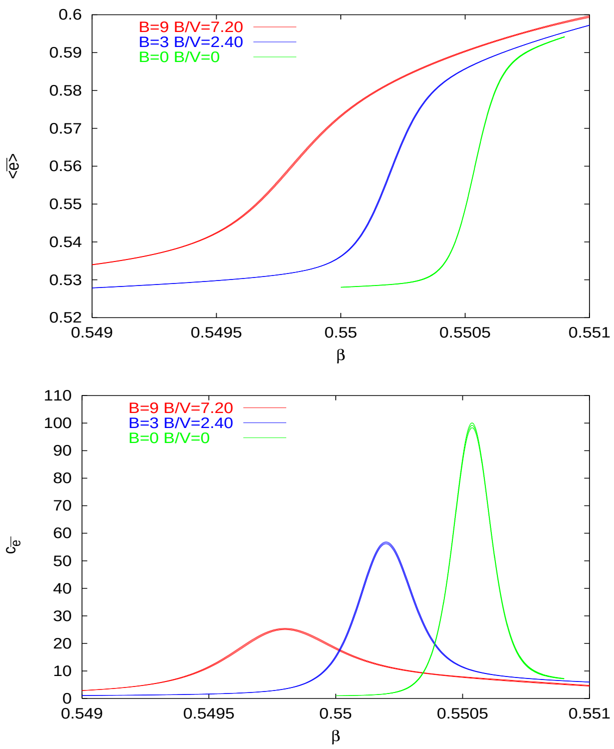


Abbildung 5.12: *Verhalten der Energie im Kanonischen bei unterschiedlichen Quarkzahlen aber gleichem Volumen,* $B/V = 0,\ 2.4,\ 7.2\ * 10^{-5},\ L = 50$

Die kritischen Werte der Suszeptibilitäten und Wendepunkte der Magnetisierung sowie der spezifischen Wärme sind in Abbildung 5.13 für verschiedene Bereiche von B/V gegen β aufgetragen. Hier erkennt man deutlich, daß der Übergang im wesentlichen nur von dem Verhältnis aus Quarkzahl und Volumen bestimmt ist. Weiterhin sieht man, daß Effekte (zu) kleiner Gitter schnell mit größer werdendem B/V abnehmen. Innerhalb der einzelnen B/V-Fenster fallen die Werte für die größeren, annähernd gleichen Quarkzahl-Volumenverhältnisse der größten Gitter in der Regel recht gut zusammen (s. a. Abb. 5.16, 5.20, 5.22, 5.24).

Aufgrunddessen ist es insofern sinnvoll, um einen Eindruck über die Abhängigkeit der kritischen β_c von dem Quarkzahl-Volumenverhältnis zu gewinnen, all diejenigen Werte, die bei den verschiedenen Quarkzahl-Volumenverhältnissen und den jeweils größten Gittern erzeugt wurden, gemeinsam zu betrachten. In erster Näherung dominiert bei kleinen Quarkzahl-Volumenverhältnissen ein exponentieller Abfall der kritischen β_c, mit zunehmenden Dichten jedoch herrscht mehr und mehr eine lineare Abhängigkeit der kritischen Werte von dem Quarkzahl-Volumenverhältnis vor (Abb. 5.13).

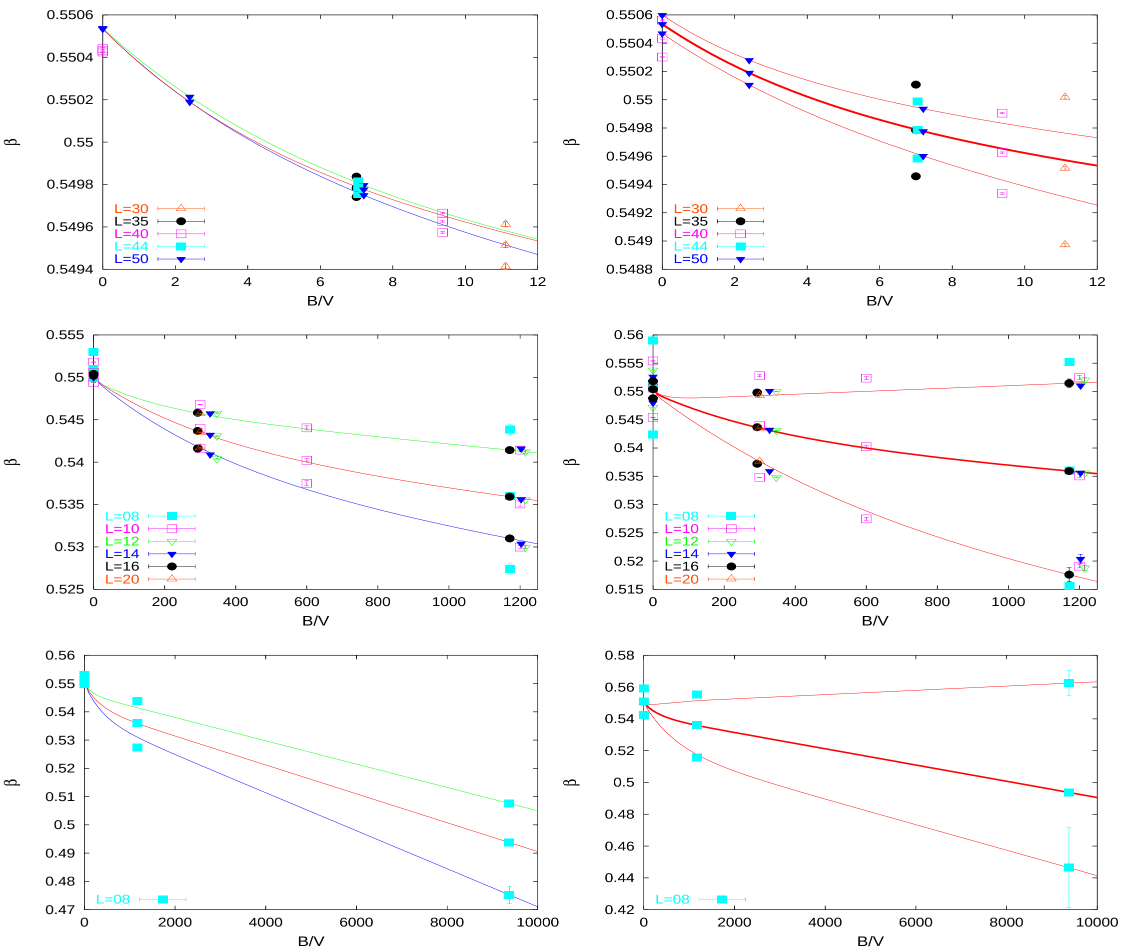


Abbildung 5.13: *Verhalten der kritischen β-Werte der Suszeptibilitäten und Wendepunkte der Magnetisierung sowie der spezifischen Wärme im Kanonischen bei unterschiedlichen Quarkzahlen und Volumina, β gegen $B/V * 10^{-5}$. Die Kurven links geben einen Eindruck für den ungefähren Verlauf der Maxima von $c_{\bar{e}}$ (grün), χ_β (rot), $\chi_{\bar{m}}$ (blau), rechts sind die Kurven der Wendepunkte, also der Verlauf der Extremalwerte der Ableitung der gemischten Suszeptibilität nach β, um die Linie der Maxima der gemischten Suszeptibilität eingezeichnet. Die funktionelle Form der (im wesentlichen um das Auge zu führen) eingezeichneten Kurven der kritischen β der Suszeptibilitäten entspricht annähernd einem exponentiellem Verlauf. Dabei wurden die entsprechenden Parameter über die Werte der größten Gitter, $L = 50, 20, 16, 8$ bestimmt. Betrachtet man andere Werte wie z.B. $L = 10$, $B/V = 600 * 10^{-5}$, die nicht für die Bestimmung der Parameter herangezogen wurden, so untermauern deren Zusammenfallen mit den Linien diese funktionelle Abhängigkeit.*

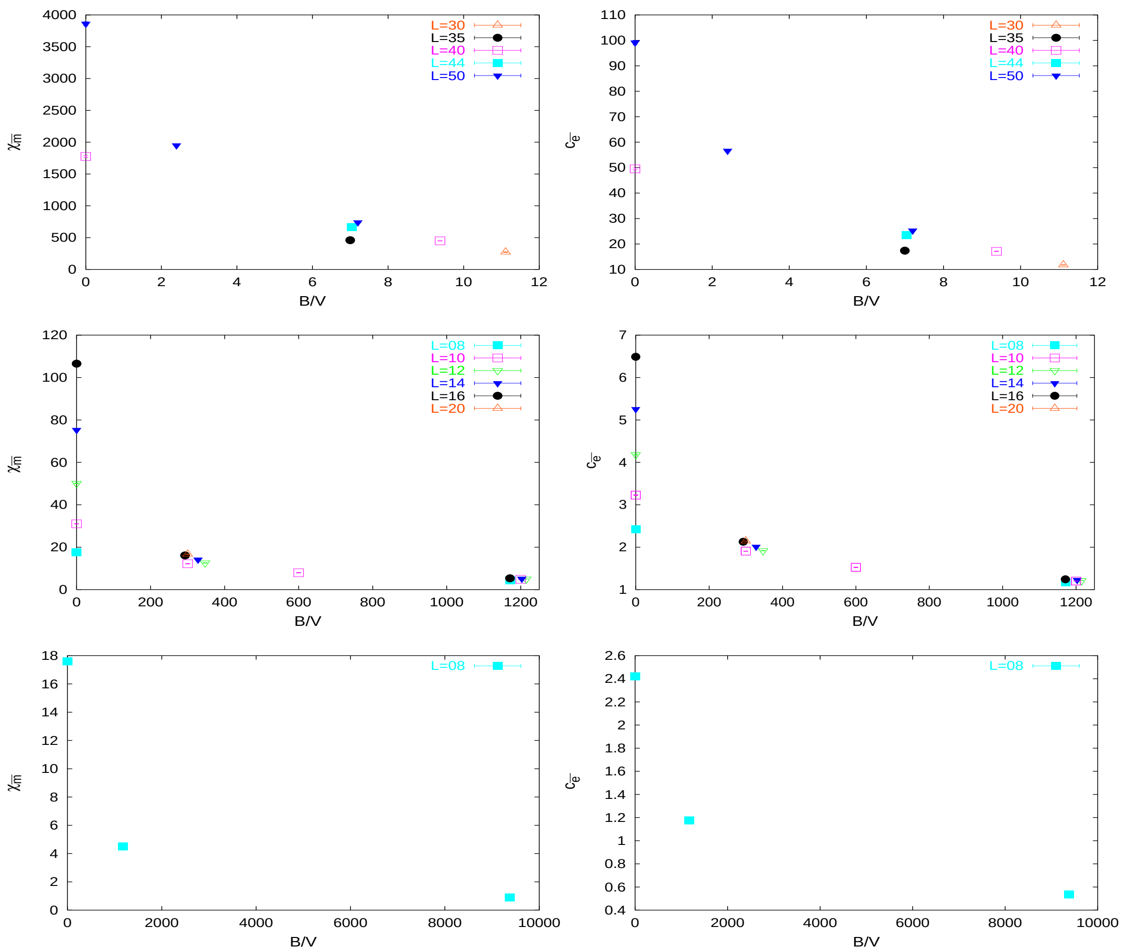


Abbildung 5.14: *Verhalten der Peakhöhen der Suszeptibilität der Magnetisierung $\chi_{\bar{m}}$ (links) sowie der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$ (rechts) im Kanonischen bei unterschiedlichen Quarkzahlen und Volumina, $\chi_{\bar{m}}$, $c_{\bar{e}}$ gegen $B/V * 10^{-5}$.*

Liegen die kritischen β-Werte der Observablen bei verschwindender Dichte noch recht nah beieinander, so unterscheiden sie sich mit zunehmender Dichte, selbst bei exakt gleichem Volumen, immer stärker. Die kritischen β-Werte der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$ fallen mit zunehmender Dichte stets am schwächsten ab, die der rein magnetischen Suszeptibilität $\chi_{\bar{m}}$ immer am stärksten. Dazwischen liegen (relativ mittig), wie auch vom Namen nicht anders zu erwarten, die kritischen β_c der gemischten Suszeptibilität χ_β, die sich aus Momenten der Magnetisierung wie auch der Energie zusammensetzt.

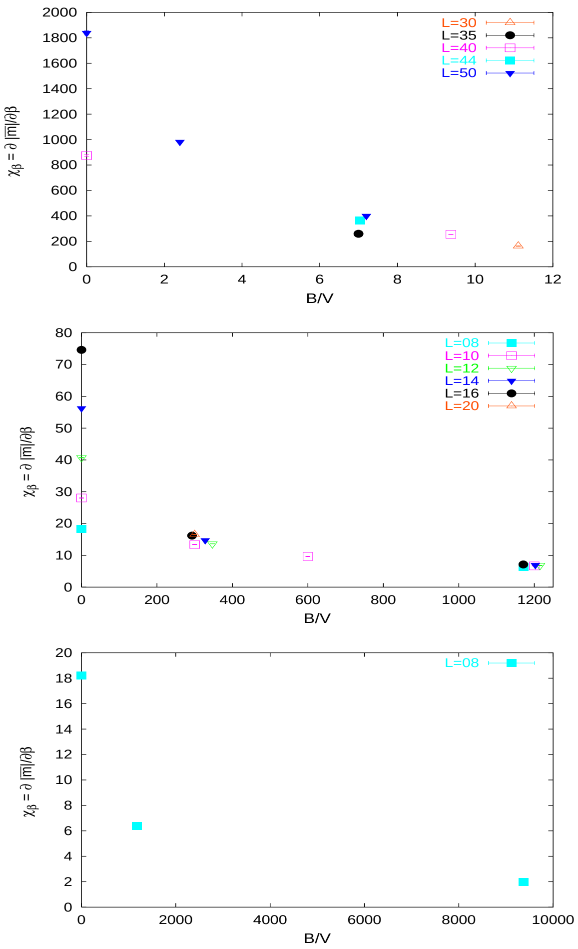


Abbildung 5.15: *Verhalten der Peakhöhen der gemischten Suszeptibilität der Magnetisierung χ_β im Kanonischen bei unterschiedlichen Quarkzahlen und Volumina, χ_β gegen $B/V * 10^{-5}$.*

Interessant ist auch das Verhalten der Wendepunkte. Diese werden bei kleinen Quarkzahl-Volumenverhältnissen vollständig durch den exponetiell-linearen Abfall dominiert. Über viele Größenordnngen von B/V betrachtet trifft dies jedoch nur für den Wendepunkt der positiven Krümmung zu. Der Wendepunkt der negativen Krümmung hingegen bleibt über große Bereiche der Quarkzahl-Volumenverhältnisse annähernd konstant. Somit läßt sich festhalten, daß der Eintritt des Phasenüberganges bzw. des Crossovers mit wachsendem B/V stark zu kleineren kritischen β verschiebt. Bei genügend großem Quark-Volumenverhältnis ist der Übergang aber bei annähernd gleichem β vollzogen.

Insgesamt ist an dieser Stelle noch einmal ein Blick auf die Definition von

$$n_B(T) = \frac{B}{3}\left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^3 T^3$$

sinnvoll. Vergleicht man die Ergebnisse der Simulationen des Pottsmodels mit denen der QCD [33] bzw. des schematischen Plots, Abb. 5.10, so wird auch hier wieder deutlich, daß im Limes hoher Temperaturen β als Analogon der Temperatur T zu betrachten ist. Das Quarkzahl-Volumenverhältnis ist in der Gitterformulierung nicht einfach mit n_B gleichzusetzen. Als Analogon ist $n_B = n_B(\beta, B/V)$ zu betrachten, sodaß sich auch hier n_B bei vorgegebenem B/V und mit variierendem β ebenfalls ändern.

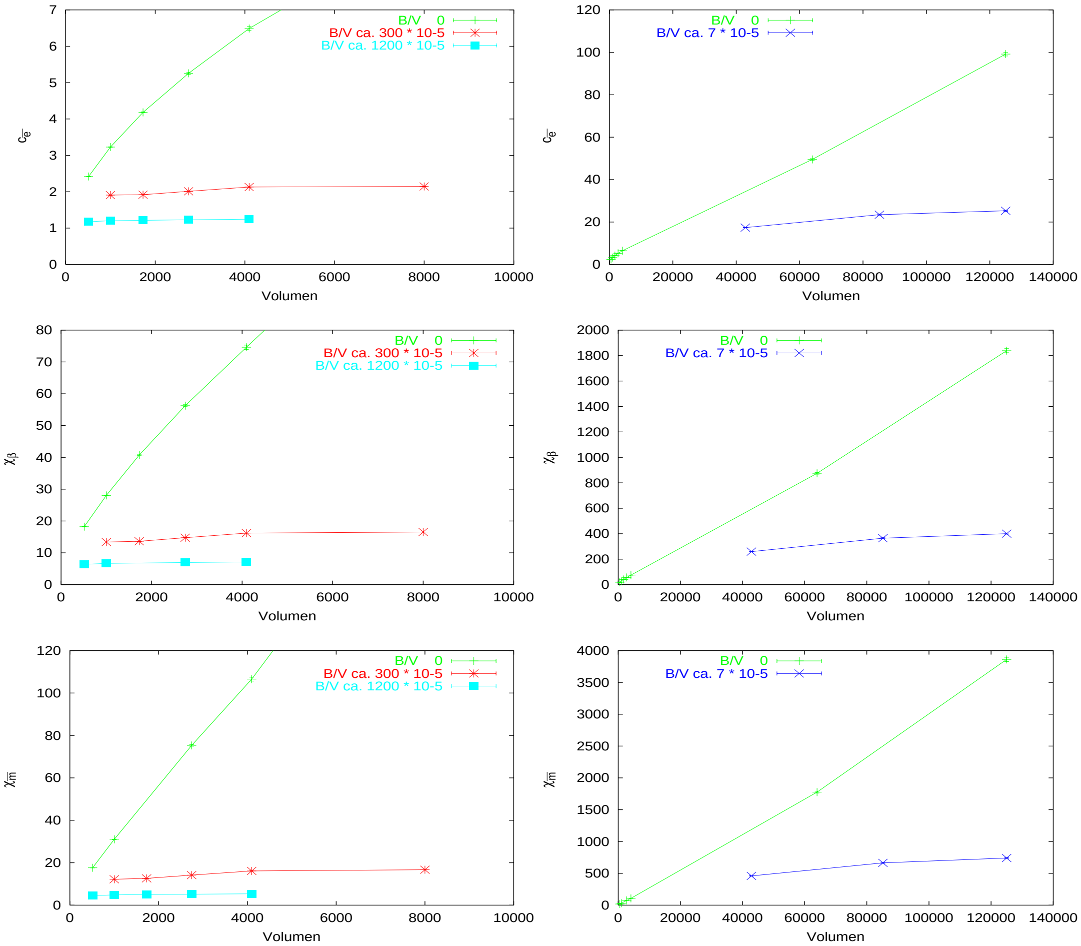


Abbildung 5.16: *Volumenabhängigkeit der Extremalwerte der Suszeptibiliät der Magnetisierung sowie der spezifischen Wärme mit einem ungefähren Quarkzahl-Volumenverhältnis von* $B/V = \ 0,\ 7,\ 300,\ 1200 * 10^{-5}$.

Wirft man einen Blick auf die Extremalwerte der Suszeptibilitäten der Magnetisierung sowie der spezifischen Wärme bei unterschiedlichen Quarkzahlen und Volumina (s. Abb. 5.14, 5.15), so stellt man ein mit steigendem Quarkzahl-Volumenverhältnis sehr rasches Abfallen der Extremalwerte fest.

Besonders interessant ist hier nun die Volumenabhängigkeit der Extremalwerte (s. Abb. 5.16). Man erkennt bei verschwindender Dichte, $B/V = 0$, klar die für einen Phasenübergang erster Ordnung charakteristische Proportionalität der Maxima zum Volumen. Sobald aber eine endliche Dichte betrachtet wird (siehe $B/V = 7,\ 300,\ 1200\ *10^{-}5$), sieht man mit größer werdendem B/V schon bei immer kleineren Volumina ein Verschwinden der Volumeneffekte. Auch in dieser Hinsicht wird hier deutlich, daß das Verhalten bei gegebener Dichte und genügend großen Volumen im wesentlichen nur noch von B/V bestimmt wird.

Ein exakte Untersuchung der Volumenabhängigkeit bei vorgegebenem B/V ist aber insofern nicht immer möglich bzw. zu simulationsaufwendig, da, wie eingangs erläutert, B ja auf Vielfache von drei beschränkt ist und aufgrund des Vorzeichenproblems auch nicht mit beliebig großen Volumina simuliert werden kann. Insofern ergeben sich in der Regel leichte Unterschiede im Quark-Volumenverhältnis.

Im Prinzip ist eine Korrektur in Abhängigkeit von B/V, eine mindestens lokal verwendbare Approximation des Verlaufs der Extremallinie, notwendig. Für kleine Quarkzahlen, $B = 3, 6, 9$, lassen sich aus obigen Gründen allerdings keine weiteren Stützstellen erzeugen. Eine korrigierende Interpolation ließe sich somit also nur für größere Quarkzahlen durchführen.

Abhängig von β ermöglichen die folgenden Abbildungen nun einen detaillierten Blick auf das Verhalten der Magnetisierung und der Energie bei ähnlicher Dichte aber unterschiedlichem Volumen. Außer den entsprechenden Suszeptibiltäten bzw. der spezifischen Wärme wird für die kanonischen Simulationen auch noch der Zusammenhang mit dem Verlauf des Erwartungswertes des Vorzeichens dargestellt.

Zum Vergleich mit den kanonischen Simulationen werden zunächst Ergebnisse bei verschwindender Dichte, aber weitestgehend gleichen Gittern gezeigt (Abb. 5.17, 5.18). Danach folgen Plots kanonischer Simulationen für die jeweils ein ungefähr gleiches Quarkzahl-Volumenverhältnis von ca. $7,\ 300,\ 1200 * 10^{-5} B/V$ (Abb. 5.19, 5.21, 5.23) gegeben ist.

Betrachtet man die Simulationsergebnisse für ein ungefähres Quark-Volumenverhältnisse von ca. $7 * 10^{-5} B/V$, so sind keine starken Änderungen in den Peakhöhen mit der Variation des Volumens festzustellen, andererseits wird durch Abb.5.19 und 5.20 aber auch noch nicht deutlich, daß man sich im asymptotischen Volumenbereich befindet. Hier wären Simulationen auf größeren Gittern wünschenswert. Bei allen anderen gezeigten Dichten variieren die Peakhöhen für die größten Gitter allerdings nur verschwindend gering bzw. sind Plateaus erkennbar.

In Abb. 5.23, $B/V = 1200 * 10^{-5}$, erkennt man für das größte Gitter deutlich die Grenzen dieses Ansatzes. Bei kleinen Kopplungen verschwindet der Erwarungswert des Vorzeichens im Rahmen der Fehler und der Fehler der Observablen, besonders gut bei den Suszeptibilitäten zu erkennen, beginnt zu divergieren.

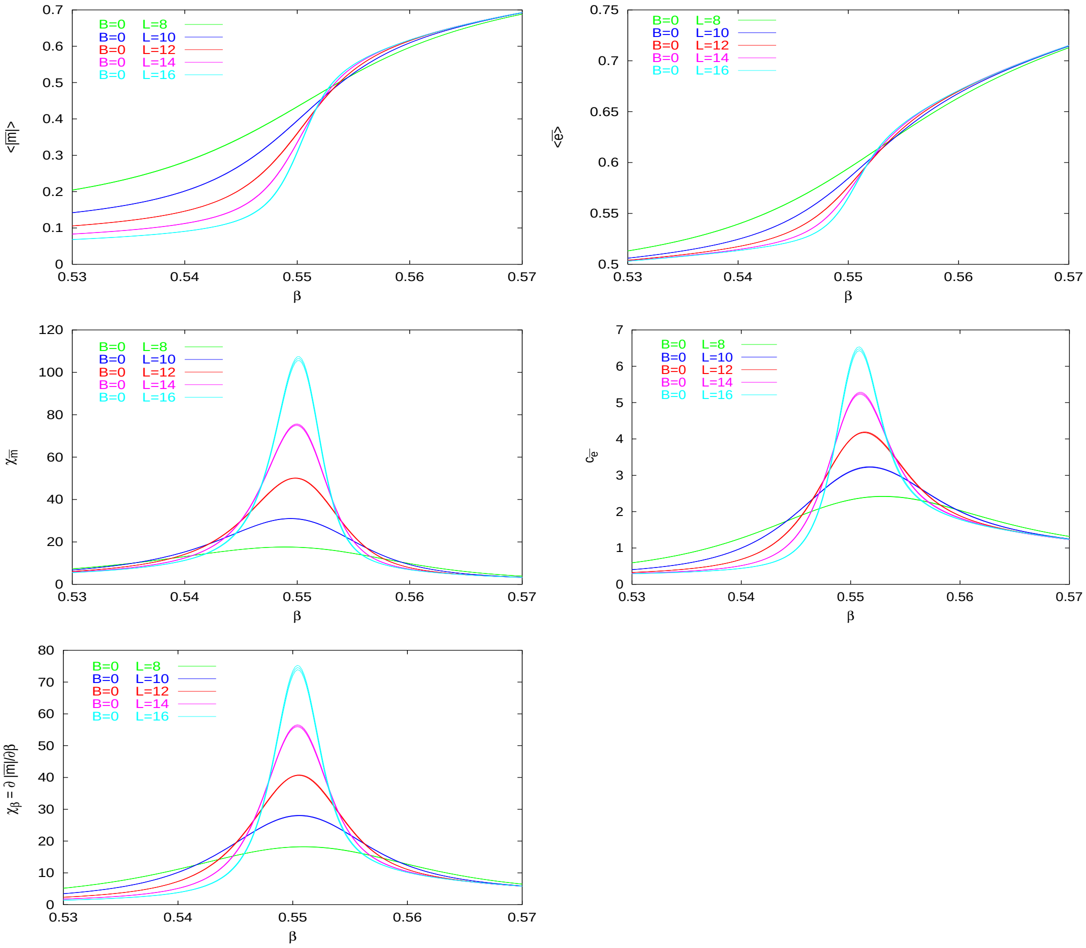


Abbildung 5.17: *Verhalten der Magnetisierung (links) sowie der Energie (rechts) bei verschwindender Dichte und unterschiedlichen Volumina,* $L = \ 8, \ 10, \ 12, \ 14, \ 16 \quad .$

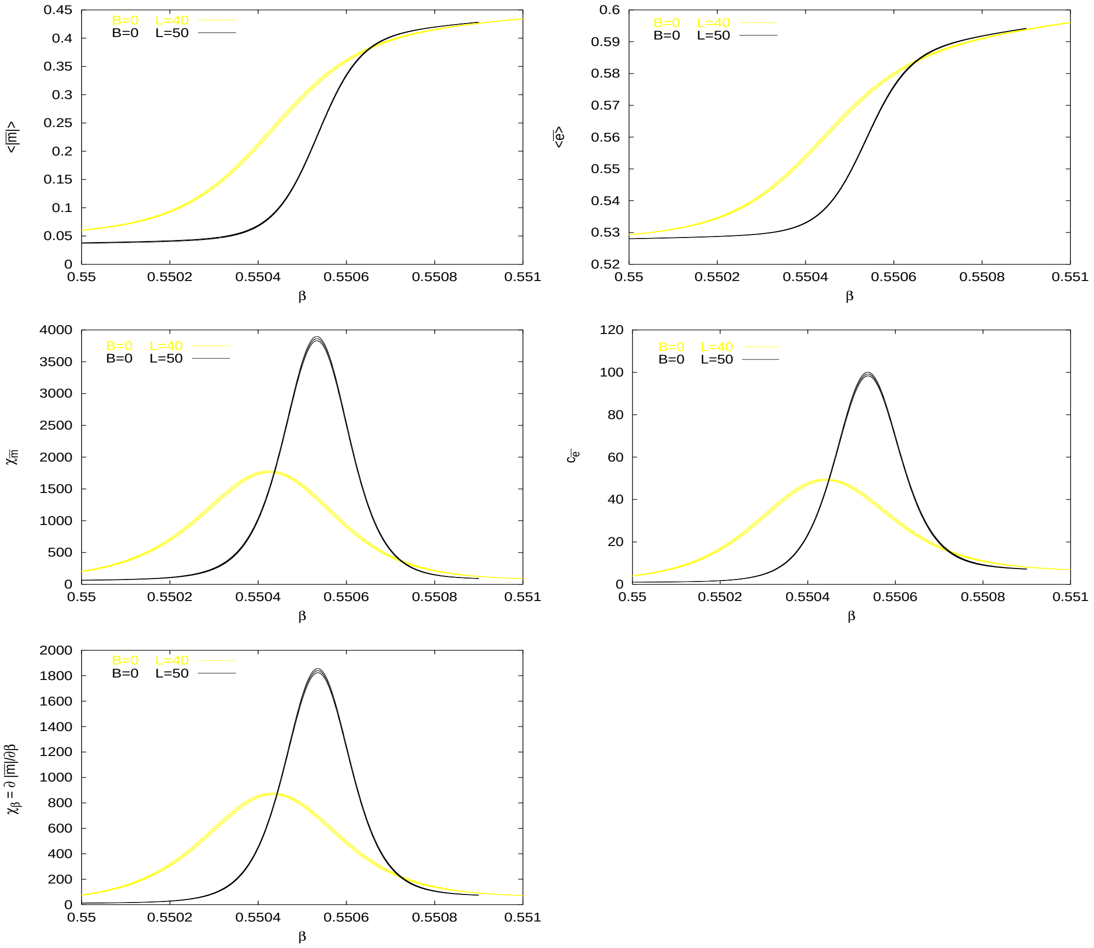


Abbildung 5.18: *Verhalten der Magnetisierung (links) sowie der Energie (rechts) bei verschwindender Dichte und unterschiedlichen Volumina,* $L = 40,\ 50$.

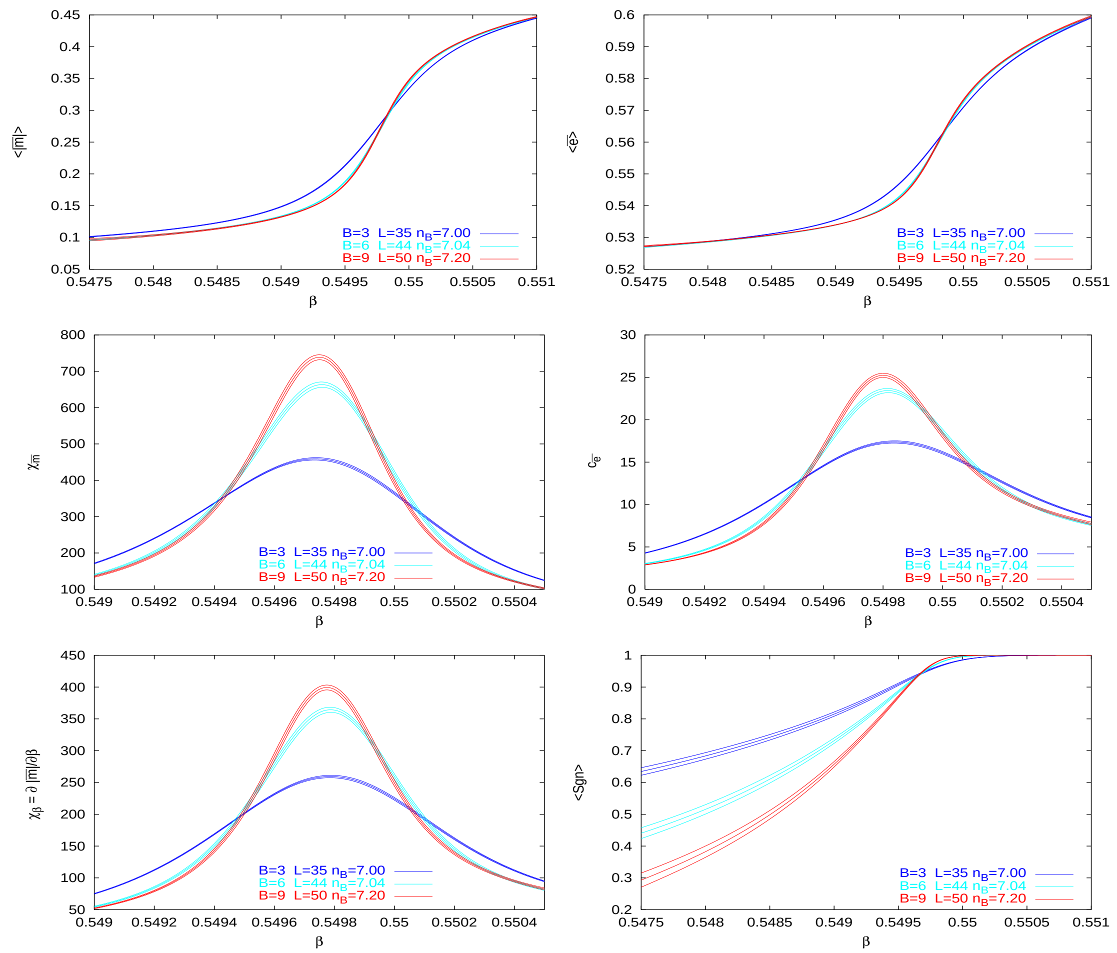


Abbildung 5.19: *Verhalten der Magnetisierung (links) sowie der Energie (rechts) und des Vorzeichens (rechts unten)im Kanonischen bei einem ungefähren Quarkzahl-Volumenverhältnis von* $B/V = 7 * 10^{-5}$ *und unterschiedlichen Volumina,* $L = 35,\ 44,\ 50$.

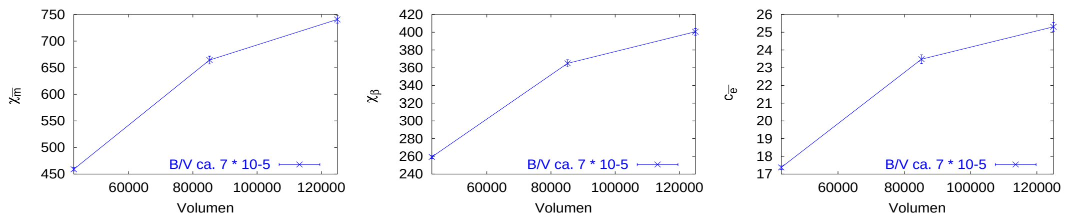


Abbildung 5.20: *Volumenabhängigkeit der Extremalwerte der Suszeptibilitäten der Magnetisierung sowie der spezifischen Wärme mit einem ungefähren Quarkzahl-Volumenverhältnis von* $B/V = \ 7 * 10^{-5}$.

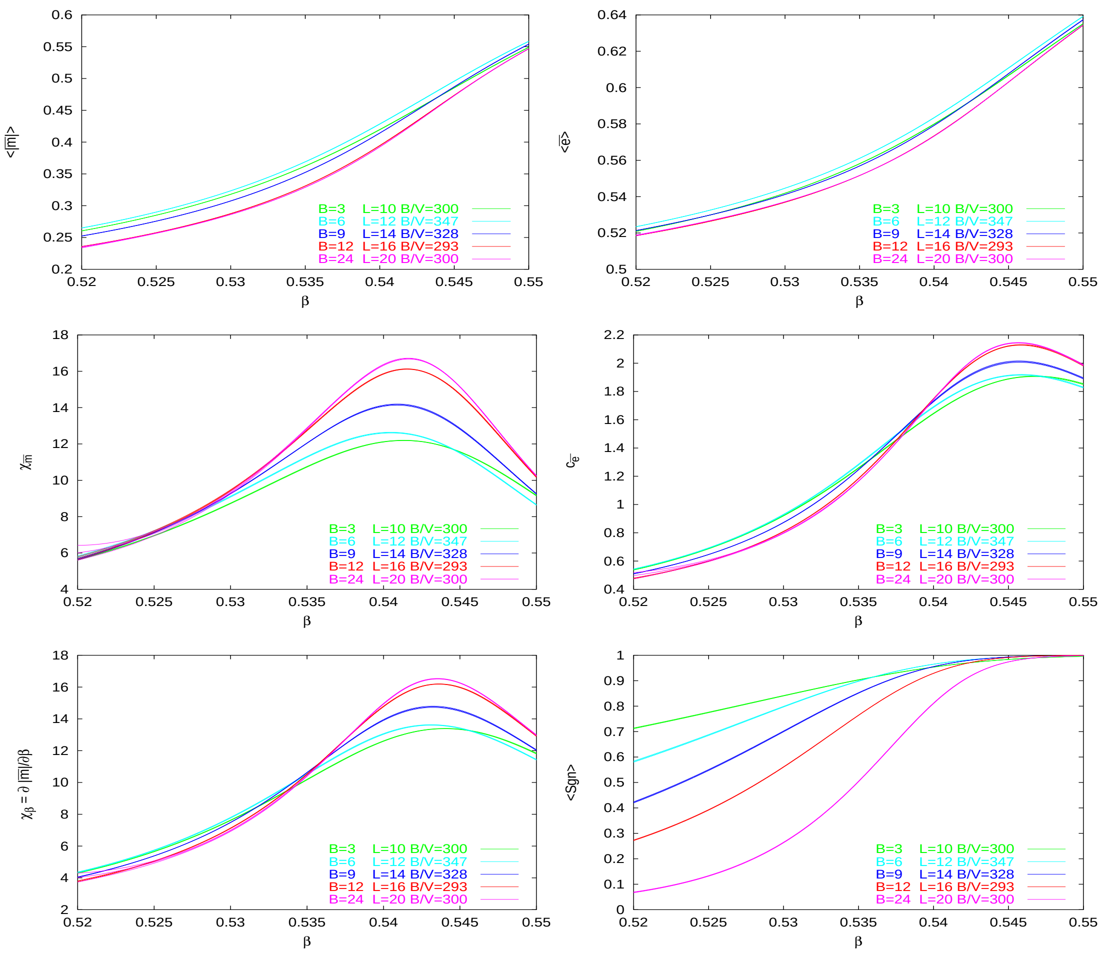


Abbildung 5.21: *Verhalten der Magnetisierung (links) sowie der Energie (rechts) und des Vorzeichens (rechts unten) im Kanonischen bei einem ungefähren Quarkzahl-Volumenverhältnis von* $B/V = 300 * 10^{-5}$ *und unterschiedlichen Volumina,* $L =$ 10, 12, 14, 16, 20 .

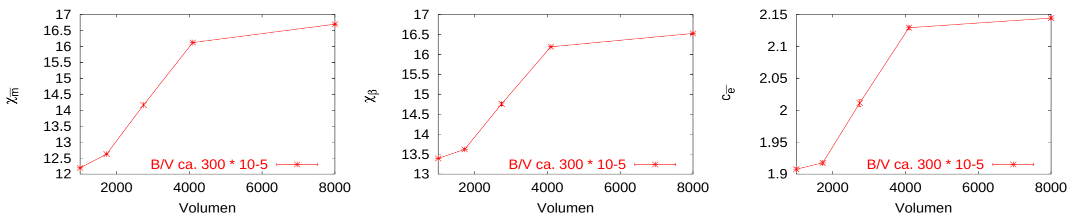


Abbildung 5.22: *Volumenabhängigkeit der Extremalwerte der Suszeptibilitäten der Magnetisierung sowie der spezifischen Wärme mit einem ungefähren Quarkzahl-Volumenverhältnis von* $B/V = 300 * 10^{-5}$.

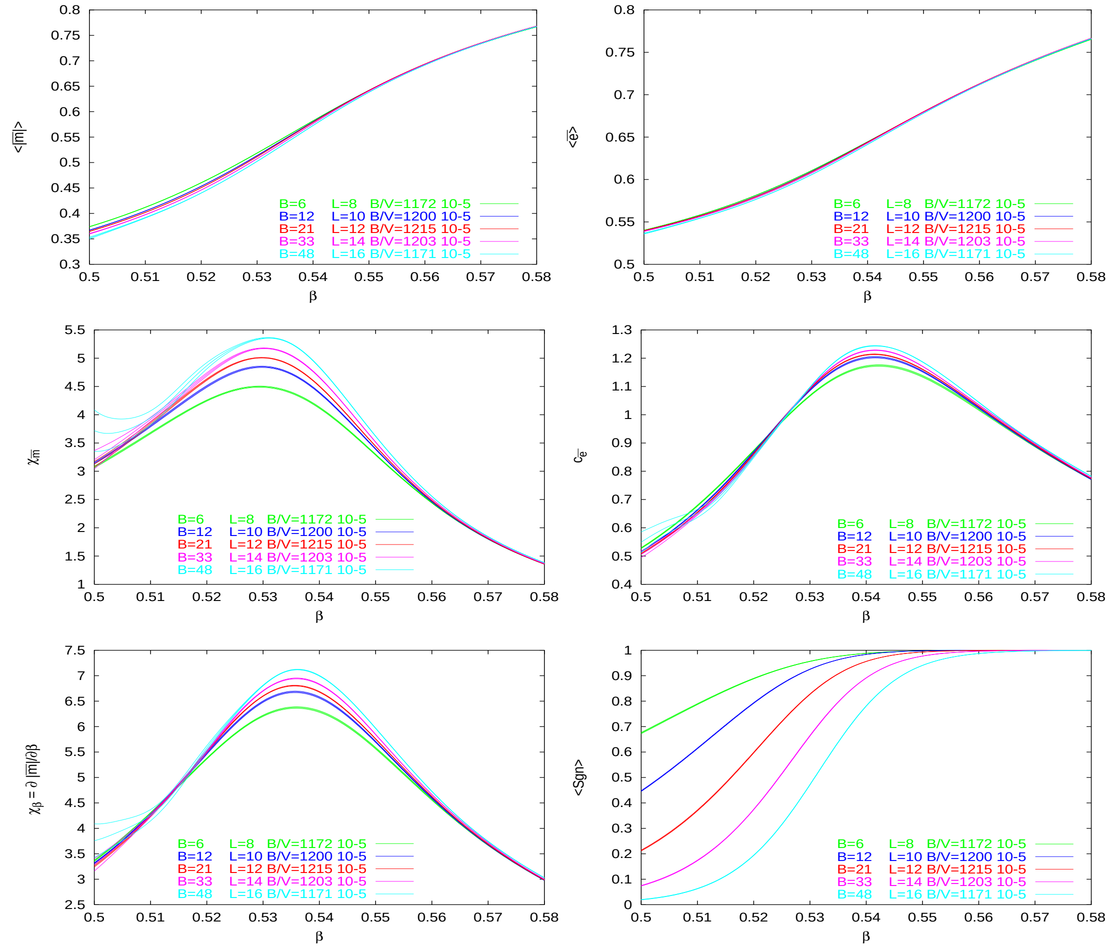


Abbildung 5.23: *Verhalten der Magnetisierung (links) sowie der Energie (rechts) und des Vorzeichens (rechts unten) im Kanonischen bei einem ungefähren Quarkzahl-Volumenverhältnis von* $B/V = 1200 * 10^{-5}$ *und unterschiedlichen Volumina,* $L = 8,\ 10,\ 12,\ 14,\ 16$.

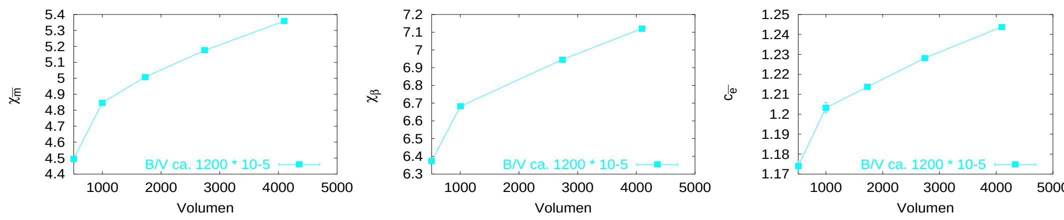


Abbildung 5.24: *Volumenabhängigkeit der Extremalwerte der Suszeptibilitäten der Magnetisierung sowie der spezifischen Wärme mit einem ungefähren Quarkzahl-Volumenverhältnis von* $B/V = 1200 * 10^{-5}$.

5.5 Übergang im Großkanonischen

Im Gegensatz zum vorgegebenen, also konstantem Quarkzahl-Volumenverhältnis im Kanonischen, beobachtet man im Großkanonischen ein sich am Phasenübergang änderndes, je nach Größe der vorgegebenen "Statischen Konstante" C mehr oder weniger sprunghaft ansteigendes Quark-Volumen Verhältnis. Dies resultiert letzlich aus der Kopplung an die Magnetisierung.

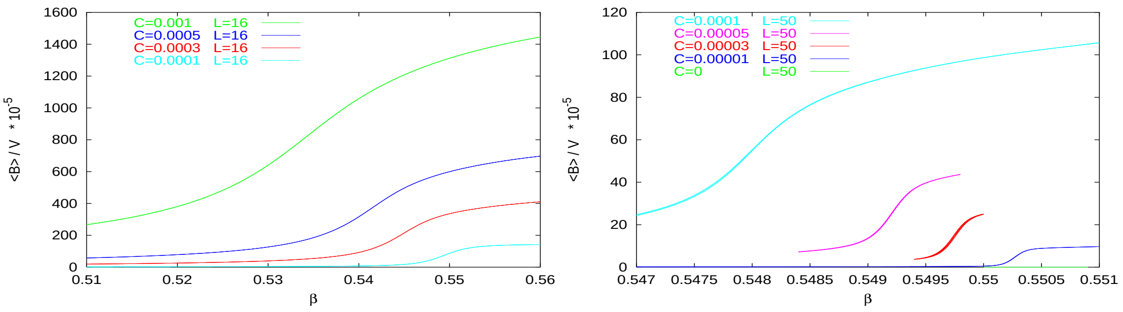


Abbildung 5.25: *$\langle B\rangle/V$ in Abhängigkeit der Kopplung für unterschiedliche "Statische Konstanten", L=16 (links) und L=50 (rechts)*

Wie man in Abbildung 5.25 deutlich erkennt, verschwindet in der ungeordneten Phase das Quarkzahl-Volumenverhältnis zwar nicht, es nimmt aber mit kleiner werdendem β immer mehr ab. In der geordneten Phase hingegen strebt es gegen einen endlichen Wert.

Betrachtet man, analog zum kanonischen Ansatz, die Magnetisierung (s. Abb. 5.26) zur Analyse des Phasenüberganges, so erkennt man auch hier, daß sie mit endlicher "Statischer Konstante" die Eigenschaft als exakter Ordnungsparameter (unendliches Volumen vorausgesetzt) verliert und in der ungeordneten Phase nicht verschwindet. Dennoch ist sie auch im Großkanonischen eine den Phasenübergang gut kennzeichnende Observable. Aufgrund der am Phasenübergang stark abnehmenden Dichte treten die durch endliche Dichten im Kanonischen verursachten Effekte vorwiegend durch die geordnete Phase auf. Geht man in beiden Ansätzen von gleichen Dichten am Phasenübergangspunkt aus, so ist im Großkanonischen die Dichte unterhalb des Phasenüberganges kleiner und oberhalb des Phasenüberganges größer als im kanonischen Ansatz. Der Phasenübergang setzt bei wachsendem β im Vergleich zum Kanonischen somit erst bei größerer Kopplung ein. Aus der geordneten Phase kommend, verursacht die relativ große Dichte einen erst bei vergleichsweiser kleiner Kopplung einsetzenden Phasenübergang. Insgesamt ergibt sich somit in Relation zum Kanonischen ein schmalerer und steilerer Übergang.

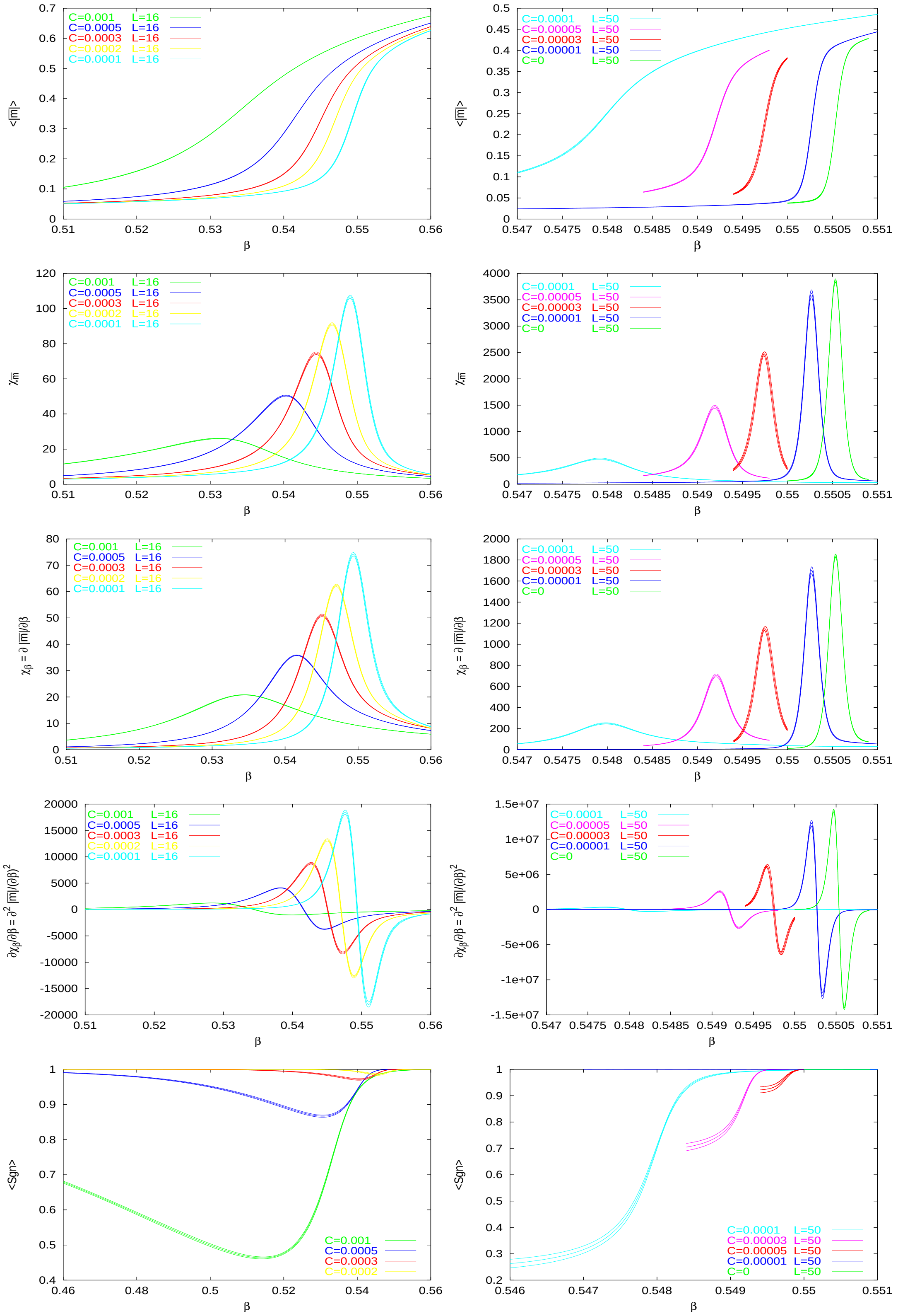


Abbildung 5.26: *Verhalten der Magnetisierung sowie des Vorzeichens bei unterschiedlichen "Statischen Konstanten", $C = 0.001,\ 0.0005,\ 0.0003,\ 0.0002,\ 0.0001$ bei $L = 16$ (links) und $C = 0.0001,\ 0.00005,\ 0.00003,\ 0.0001,\ 0$ bei $L = 50$ (rechts).*

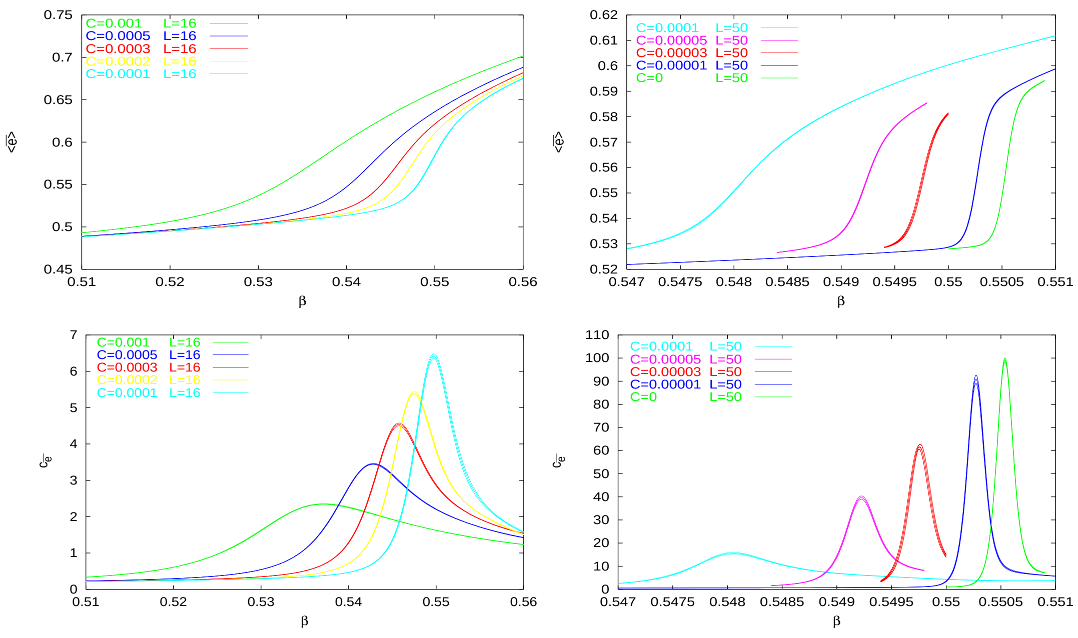


Abbildung 5.27: *Verhalten der Energie bei unterschiedlichen "Statischen Konstanten", $C = 0.001,\ 0.0005,\ 0.0003,\ 0.0002,\ 0.0001$ bei $L = 16$ (links) und $C = 0.0001,\ 0.00005,\ 0.00003,\ 0.0001,\ 0$ bei $L = 50$ (rechts).*

Abbildung 5.26 zeigt den Verlauf der Magnetisierung für verschiedene, relativ große "Statische Konstanten" bei dem kleinsten Gitter , $L = 16$, und für kleinere "Statische Konstanten" bei dem größten im Großkanonischen benutzten Gitter, $L = 50$. Weiterhin sind, wie auch im Kanonischen, die Suszeptibiliäten der Magnetisierung $\chi_{\bar{m}}$ nach dem Fluktuations-Diszipationstheorem, sowie die erste und zweite Ableitung der Magnetisierung, χ_β und $\partial\chi_\beta/\partial\beta$ angegeben. In Verbindung mit Abbildung 5.25 läßt sich somit deutlich der Zusammenhang zwischen endlichen Dichten und der Struktur, insbesondere der Breite und der Steilheit, des Phasenüberganges erkennen. Abbildung 5.27 zeigt den Verlauf der zugehörigen Energien bzw. der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$.

Interessant ist nun, auch im Hinblick auf die Ordnung des Phasenüberganges, die Abhängigkeit der kritischen Werte von der Gittergröße.

Vergleicht man zunächst die kritische Kopplung der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$, der gemischten Suszeptibilität χ_β und der magnetischen Suszeptiblität $\chi_{\bar{m}}$, s. Abb. 5.28, so erkennt man, daß die Volumenabhängigkeiten nicht nur von der Observablen, sondern auch stark von der jeweiligen "Statischen Konstante" C abhängen.

Betrachtet man die spezifische Wärme und die gemischte Suszeptibilität bei verschwindender Dichte, so bestätigt sich der schon von Jahnke et al. [?] beschriebene Dip in der Abhängigkeit der Kopplung vom Volumen. Dieser ist bei der gemischten Suszeptibiblität sogar noch stärker ausgeprägt. Bei der spezifischen Wärme hingegen führen die Finite Size Effekte bei kleinen Volumen zu einem besonders starken Abfall der kritischen Kopplung mit zunehmendem Volumen. Im Gegensatz hierzu steigt die kritische Kopplung der magnetischen Suszeptibilität bei verschwindender Dichte mit wachsendem Volumen monoton an.

Blickt man auf große "Statische Konstanten", z.B. $C = 0.0001$, so fällt unabhängig von der Observablen die kritische Kopplung mit dem Volumen ab. Der stärkste Abfall ist hier bei der spezifischen Wärme und der gemischten Suszeptibilität festzustellen.

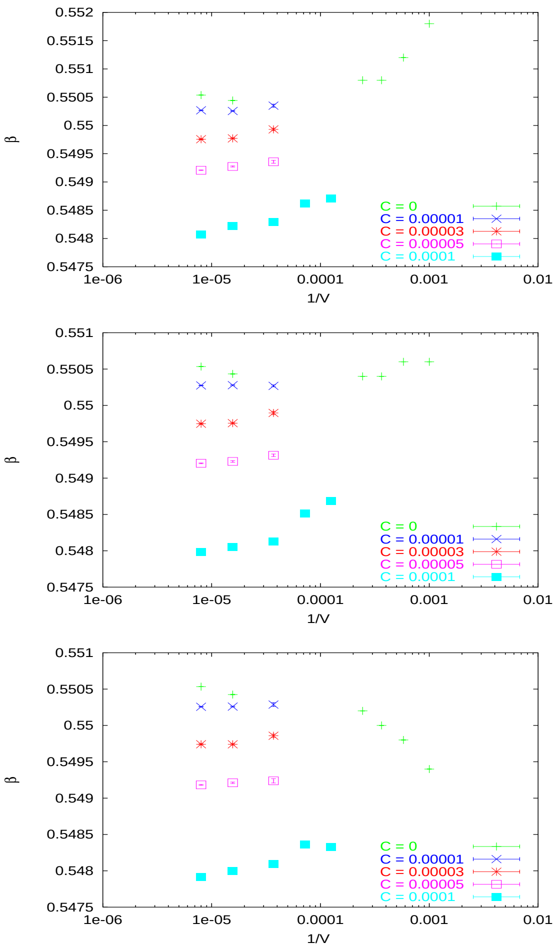


Abbildung 5.28: *Kritische Kopplung β der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$ (oben), der gemischten und der magnetischen Suszeptibilität, χ_{β} (mittig) und $\chi_{\bar{m}}$ (unten) in Abhängigkeit vom Volumen.*

Besonderes Augenmerk verdient aber der mittlere Bereich mit $C = 0.00003$ und $C = 0.00005$. Hier ist im Großkanonischen die Volumenabhängigkeit der kritischen Kopplung nur sehr schwach ausgeprägt. Dies mag man als einen Hinweis auf die besondere Bedeutung dieser Kopplungen ansehen.

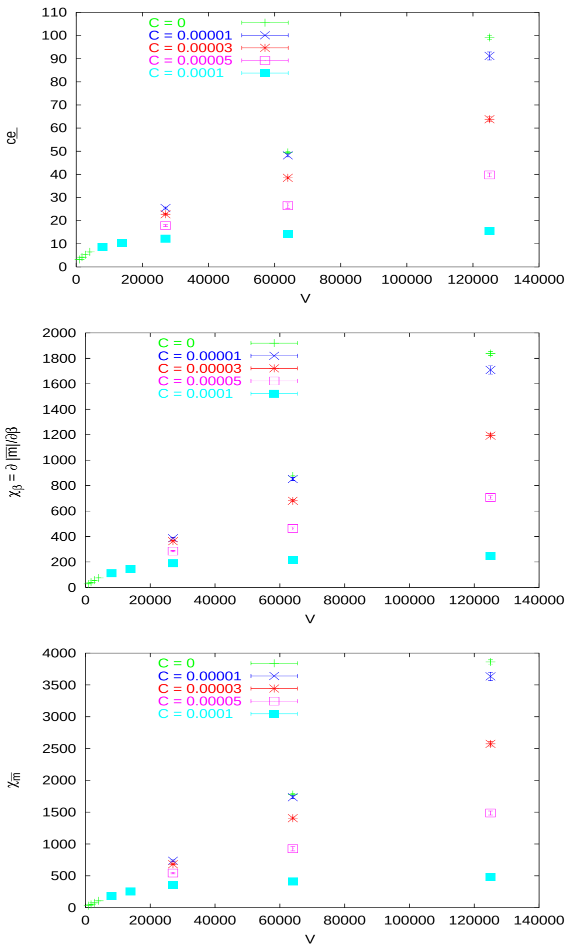


Abbildung 5.29: *Extremalwerte der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$ (oben), der gemischten und der magnetischen Suszeptibilität, χ_β (mittig) und $\chi_{\bar{m}}$ (unten), in Abhängigkeit vom Volumen.*

Wirft man einen Blick auf die Volumenabhängigkeit der Extremalwerte der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$, der gemischten Suszeptibilität χ_β und der magnetischen Suszeptiblität $\chi_{\bar{m}}$, s. Abb. 5.29, so kann man bis zu eben der "Statischen Konstante" von $C = 0.00003$ eine lineare Abhängigkeit der Peakhöhen von dem Volumen erkennen. Ab $C = 0.00005$ verliert sich allmählich dieses Verhalten. Bei $C = 0.0001$ bleiben die Extremalwerte schon ab relativ kleinem Volumen konstant. Aufgrund der Renormierungstheorie läßt sich somit der kritische Endpunkt auf das Intervall zwischen $C = 0.00003$ und $C = 0.00005$ eingrenzen. Bei kleineren "Statischen Konstanten" liegt somit ein Phasenübergang erster Ordnung vor.

Ein auf den gleichen zugrundeliegenden Kriterien beruhendes, aber quantitativeres Verfahren zur Bestimmung des kritischen Endpunktes bzw. des Bereichs des Phasenüberganges erster Ordnung und der Crossoverregion läßt sich durch die Analyse der Abhängigkeiten der Extremalwerte der beiden größten Gitter von der "Statischen Konstante durchführen. Betrachtet man die mit dem Volumen normierten Extremalwerte, s. Abb. 5.30, links, zeichnet sich der Bereich des Phasenüberganges erster Ordnung, aufgrund der linearen Abhängigkeit der Peakhöhen vom Volumen, durch ein Zusammenfallen der Extremalwerte aus.

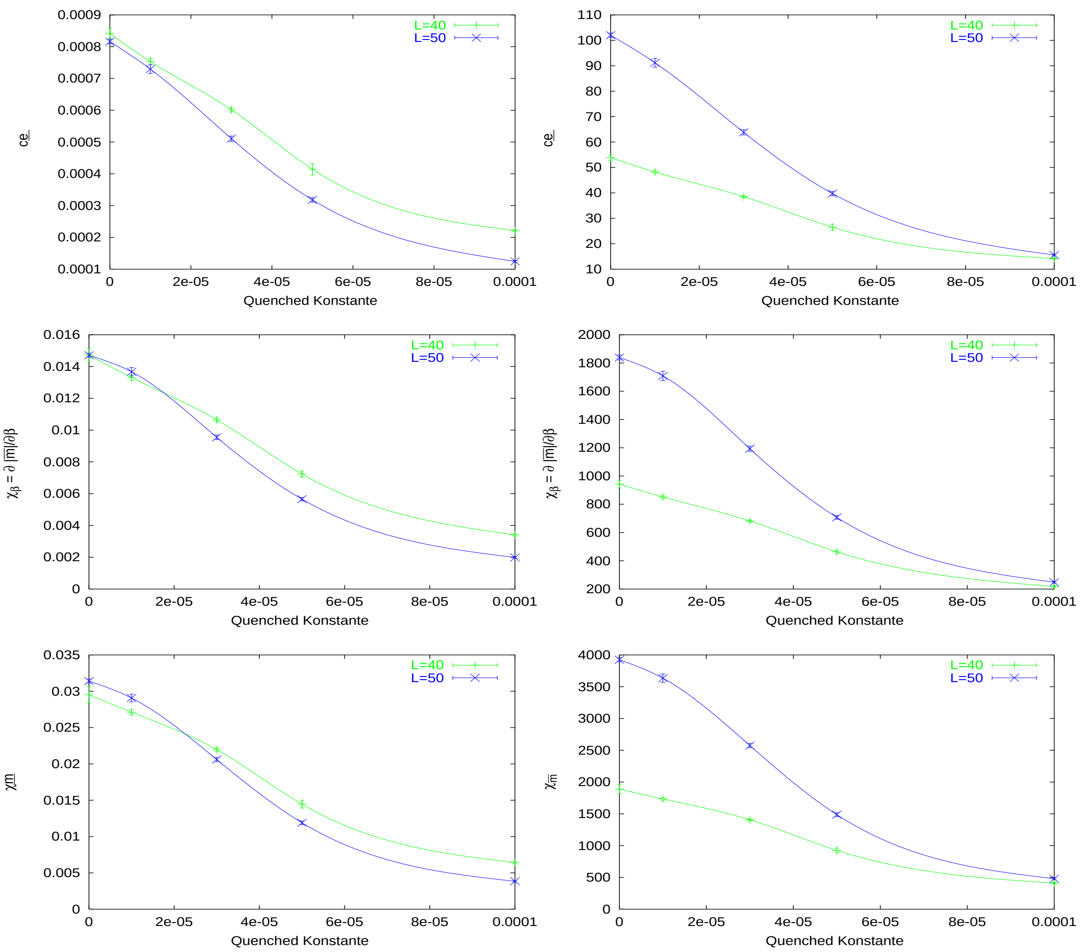


Abbildung 5.30: *Extremalwerte der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$, der gemischten und der magnetischen Suszeptibilität, χ_β und $\chi_{\bar{m}}$, in Abhängigkeit von der "Statischen Konstante" C, links durch das Volumen normiert.*

Der Crossoverbereich, der durch das Fehlen der Volumenabhängigkeit charakterisiert ist, wird entsprechend durch das Zusammenfallen der nicht normierten Extremalwerte, s. Abb. 5.30, rechts, bestimmt.

Dieses Verfahren setzt allerdings ausreichend große Gitter voraus. Insgesamt erhält man so nur ein sich mit größeren Gittern eventuell noch verkleinerndes Intervall, in dem sich der kritische Endpunkt befindet. Es ermöglicht eine Abschätzung der "Statischen Konstante", bis zu der sich mindestens noch ein Phasenübergang erster Ordnung vollzieht, deren Wert mit wachsendem Volumen weiter ansteigen könnte.

Verfolgt man die Kurven (Splines) der magnetischen Suszeptiblität, so kann man bis ca. $C = 0.00003$ ein Übereinstimmen der normierten Extremalwerte festellen. Bei den anderen Observablen unterscheiden sich die normierten Peakhöhen schon eher. Allen Observablen ist aber ein Zusammenfallen der unnormierten Werte bei $C = 0.0001$ gemein.

Somit läßt sich aufgrund der Beschränktheit der Gitter bis max. $L = 50$ leider nur ein recht großes Intervall von $C_{kritisch} \in [0.00003, 0.0001]$ angeben.

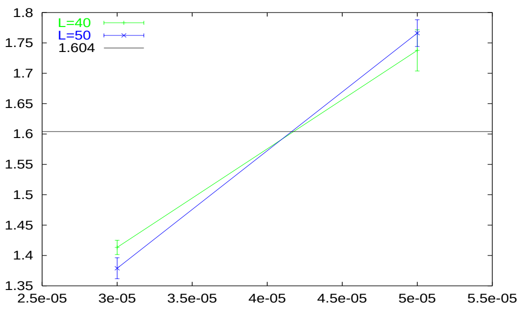
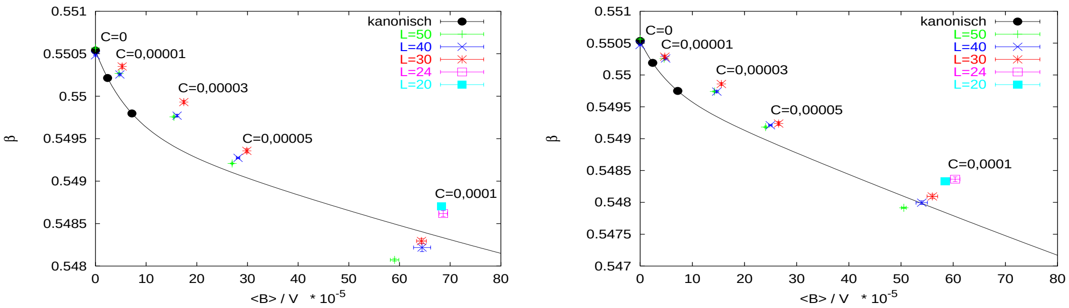


Abbildung 5.31: *Schnittpunkte der 2. Bindercumulante $B^4_{r,\bar{m}}$, Gl.(4.18), für $B^3_{r,\bar{m}} = 0$, Gl.(4.19), der Fluktuationen der isingähnlichen, magnetisierungsartigen Observablen*

Ein weiterer Weg zur Bestimmung des kritischen Endpunkts und gleichzeitig der Universalitätsklasse bietet, wie oben beschrieben, die Analyse der der Fluktuationen der isingähnlichen, magnetisierungsartigen Observablen. Betrachtet man den Schnittpunkt der sich durch Interpolation der am Nulldurchgang (dieser stimmt mit dem Minimun von $B^4_{r,\bar{m}}$ überein) der 3. Bindercumulante $B^3_{r,\bar{m}}$ gemessenen Werte der 2. Bindercumulanten $B^4_{r,\bar{m}}$ ergebenen Kurven der verschiedenen Gittergrößen, so kann man im Rahmen der Fehler als minimale Grenze für den Phasenübergangsbereich 1. Ordnung wieder $C = 0.00003$ ausmachen. Allerdings liegt auch $C = 0.00005$ innerhalb der Fehlertoleranz für die Schnittpunkte. Der wahrscheinlichste Wert, $B^4_{r,\bar{m}} = 1.59(20)$ am Schnittpunkt $C = 0.00041$, stimmt jedoch recht gut mit dem für die Ising-Universalitätsklasse charakteristischen Wert von 1.604(1) [34] überein. Die universellen Werte der Gruppe $O(4)$), 1.092(3) [35], und der Gruppe $O(2)$, 1.233(6) [36], sind im Rahmen der Fehler mit den gemessen Werten nicht verträglich. Aufgrund der doch relativ großen Fehler sollte man dies allerdings nur zurückhaltend bewerten und hierin lediglich ein erstes Indiz für die Ising-Universalitätsklasse sehen.

Mit Hinblick auf die Übertragbarkeit der im Großkanonischen gewonnen Werte auf die Simulationen im kanonischen Ansatz ist nun der Erwartungswert der Quarkzahl besonders interessant. Im thermodynamischen Limes entspricht dieser der im Kanonischen vorgegebenen Quarkzahl. Gleiche

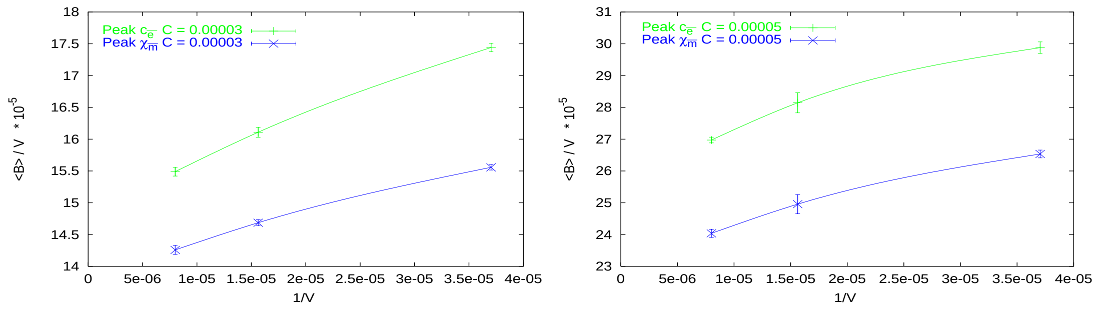


(a) Energie (b) Magnetisierung

Abbildung 5.32: *Kritische β in Abhängigkeit der Dichte am Peak der spezifischen Wärme $c_{\bar{e}}$ (a) und der magnetischen Suszeptibilität $\chi_{\bar{m}}$ (b). Zum Vergleich mit dem kanonischen Ansatz ist als ungefährer Anhaltspunkt die durch die kanonischen Werte der jeweils größtmöglichen Gitter gelegte Kurve mit eingezeichnet.*

Kopplung in β und gleiches Quarkzahl-Volumenverhältnis vorausgesetzt, sollten somit im wesentlichen gleiche Systeme vorliegen. In der Praxis, auf endlichen Gittern und bei völlig unterschiedlichem Finite-Size-Scaling Verhalten, gebietet sich jedoch eine gewisse Vorsicht, will man beide Ansätze vergleichen. Insbesondere wenn man die am Phasenübergangspunkt (bzw. Crossoverpunkt) im Großkanonischen gemessen Erwartungswerte der Baryonenzahl betrachtet, ist nicht nur die Abhängigkeit von der "Statischen Konstante zu berücksichtigen, sondern die mit der Variation des Volumens einhergehende Veränderung der kritischen Kopplung β, die wiederum eine mehr oder weniger sprunghafte Änderung im Erwartungswert der Baryonenzahl bedingt (Abb.5.32).

Letzlich führt dies somit zu einem in mehreren Dimensionen zu betrachtenden, recht komplexen und aufgrund der Sensitivität der Dichte gegenüber der kritischen Kopplung β recht schwer zu bestimmendem Finite-Size-Scaling Verhalten. Die in Abb.5.32 zu erkennenden Gruppen entsprechen jeweils gleichen "Statischen Konstanten" ($C =$ 0, 0.00001, 0.00003, 0.00005 und 0.0001). Deutlich ist die simultane Variation des Ewartungswertes der Quarkzahl sowie der Kopplung β mit wachsender Gittergröße zu erkennen. Weiterhin sei bemerkt, daß Fehler in Richtung der β- und der $\langle B \rangle / V$-Achse zu berücksichtigen sind.



(a) C = 0.00003 (b) C = 0.00005

Abbildung 5.33: *Volumenabhängigkeit des Erwartungswertes der Quarkzahl am Peak der spezifischen Wärme* $c_{\bar{e}}$ *und der magnetischen Suszeptibilität* $\chi_{\bar{m}}$ *für* $C = 0.00003$ *und* $C = 0.00005$ *.*

Trotz dieser Komplikationen kann man, geht man von $C = 0.00003$ als minimale Grenze für den Phasenübergangsbereich erster Ordnung aus, als konservative Schätzung ein Verhältnis von Quarkzahl und Volumen, bei dem auch im thermodynamischen Limes noch ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt (s. Abb. 5.33) , von ca. $12 * 10^{-5} \langle B \rangle / V$ angeben.

Kapitel 6

Histogramme

Eine weitere Möglichkeit, Aussagen über die Natur des Phasenüberganges machen zu können, ist die Verteilung der Observablen zu analysieren.

Mittels des großkanonischen Ansatz wird im Abschnitt 6.1 zunächst die latente Wärme bestimmt. Die Oberflächenspannung wird dann im folgenden Abschnitt 6.2 mit Hilfe der Histogramme der isingähnlichen, magnetisierungsartigen Observablen bestimmt. Somit ergeben sich zwei weitere Intervalle, in denen der kritische Endpunkt liegt. Im letzten Abschnitt 6.3 werden die kombinierten Verteilungen der energie- und magnetisierungsartigen Observablen gezeigt und dadurch das universelle Verhalten des Systems in die Ising-Klasse eingeordnet.

In allen Abschnitten werden noch entsprechende, im kanonischen Ansatz gewonnene, Histogramme für jeweils zwei Quarkzahl-Volumenverhältnisse vorgestellt, die dem Phasenübergangsbereich erster Ordnung zugeordnet werden.

6.1 Latente Wärme

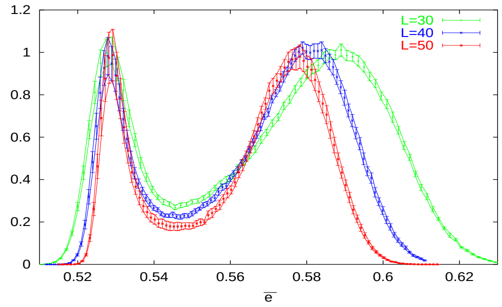
Aussagen über die latente Wärme liefern Histogramme der Energie. Dazu sind die Abstände der Peaks zu ermitteln und von Finite-Size-Effekten zu bereinigen.

Will man die Energiewerte der Peakmaxima incl. Jackknifefehler bestimmen, so reicht die in Abbildung 6.2 aufgund der Übersichtlichkeit gezeigte Auflösung der Histogramme nicht aus. Zur exakten Analyse der Werte wurden die mit Hilfe der Histogramm-Methode nach Ferrenberg und Swendsen umgewichteten Histogramme der Observablen in 1000 Intervalle eingeteilt. Diese Histogramme wurden durch Mittelung der Einträge über die jeweils umliegenden 5 Nachbarn geglättet. Um mit Hinblick auf das Jackknife-Verfahren eine quasikontinuierliche Einhüllende zu erzeugen, wurden durch einen kubischen Spline weitere 9 Punkte zwischen den Stützstellen berechnet, so daß insgesamt eine Auflösung von 10000 Werten zur Verfügung stand. Ebenso wurde mit den Jackknife-Unterdatensätzen verfahren.

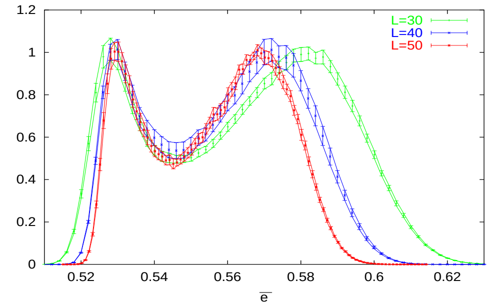
Dies erwies sich als notwendig, um trotz der scharfen Peaks der Energiemaxima aus der ungeordneten Phase noch mit der Standard-Jacknife Methode arbeiten zu können und nicht auf die weiter oben beschriebene viel rechenzeitintensivere *delete-d* Jackknife-Methode zurückgreifen zu müssen. Ohne die Interpolation lagen die Bias-korrigierten Jackknife-Erwartunswerte weit entfernt von den einfachen Mittelwerten und waren auch im Vergleich zum Plot augenscheinlich falsch.

Desweiteren wurde unter anderem so auch die latente Wärme mit Jackknife-Fehlern direkt bestimmt.

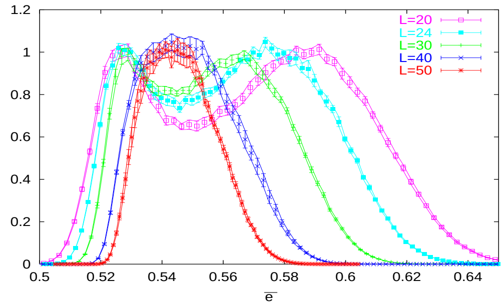
In Abbildung 6.1 werden die Histogramme der Energie, ungefähr auf eins normiert, für verschiedene "Statische Konstanten" C gezeigt. Für $C = 0.00003$ (Abb.6.1.a) und $C = 0.00005$ (Abb.6.1.b) läßt sich im Rahmen der untersuchten Gittergrößen stets eine klare Doppelpeakstruktur ausmachen. Im Unterschied und im Vergleich hierzu zeigt Abb.6.1.c für $C = 0.0001$ eine mit zunehmendem Volumen verschwindende Doppelpeakstruktur. Allerdings bedeutet dies a priori nicht, daß im thermodynamischen Limes keine latente Wärme mehr vorliegt. Aufgrund der bei endlichem Volumen gegebenen endlichen Breite der Peaks mögen zwar zwei einzelne Peaks vorhanden, aber nur nicht mehr auflösbar sein.



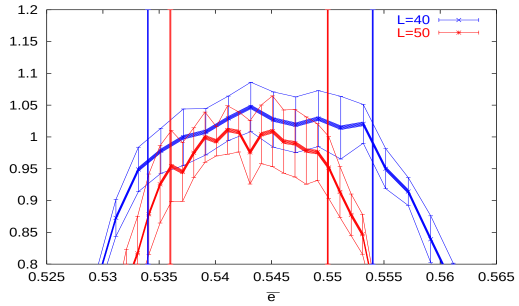
(a) $C = 0.00003$



(b) $C = 0.00005$

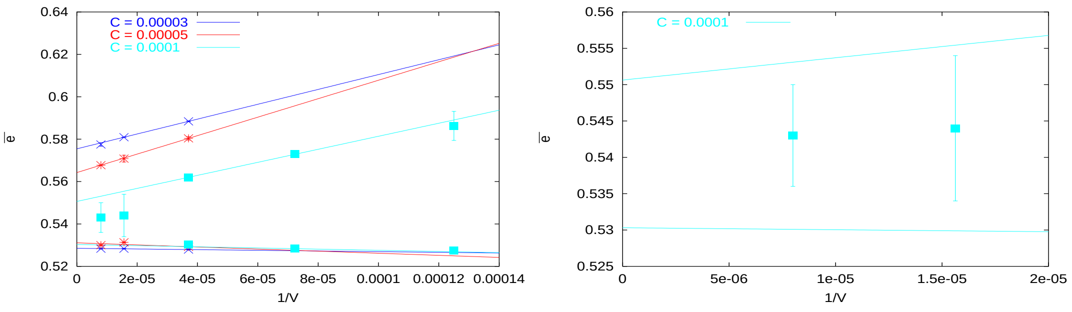


(c) $C = 0.0001$



(d) $C = 0.0001$, Peakbreiten $L = 40, 50$

Abbildung 6.1: *Histogramme der Energie zu verschiedenen "Statischen Konstanten" auf jeweils mehreren Volumina. Angegeben sind weiterhin per Jackknife ermittelte Fehler.*



(a) (b)

Abbildung 6.2: *Volumenabhängigkeit der Peakmaxima der Histogramme der Energie (a). In (b) sind die Abweichungen der Peakbreiten von dem linearen Fit durch die Maxima der Histogramme mit klarer Doppelpeakstruktur gegen das Inverse des Volumens für $C = 0.0001$ dargestellt.*

Die in Abb. 6.2.a gezeigten Werte beruhen alle auf der oben beschrieben Jackknifeanalyse, eine Außnahme bilden jedoch die in Abb.6.2.a,b eingetragenen Werte für $C = 0.0001$ und $L = 40, 50$, also diejenigen Werte, bei denen keine Doppelpeakstruktur mehr zu erkennen ist. Um sie dennoch mit in die Finite-Size-Analyse einzubeziehen, wurde als maximal möglicher Peakabstand die gesammte Peakbreite bestimmt, siehe Abb. 6.1.d. In Abb.6.2 wurde für diese Werte entsprechend nur ein Wert, der ungefähre Peakmittelpunkt, mit der Peakbreite als Fehler eingetragen.

Während die gegen das Inverse des Volumens aufgetragenen Werte der Maxima für $C = 0.00003$ und $C = 0.00005$ sich im Rahmen der Fehler durch eine Gerade fitten lassen, ist dies, mit der Maximalannahme für den Peakabstand als Peakbreite, für die entsprechenden Werte für $C = 0.0001$ nicht der Fall. Der in Abb.6.2 für $C = 0.0001$ gezeigt Fitversuch beruht auf dem Fit durch die Werte mit klarer Doppelpeakstruktur.

Deutlicher wird der Unterschied in der Volumenabhängigkeit jedoch, wenn man sich die direkt gemessenen Werte der latenten Wärme anschaut. Während sich auch die latente Wärme für $C = 0.00003$ und $C = 0.00005$ linear gegen das Inverse des Volumens fitten läßt, so ist ein Geradenfit für $C = 0.0001$ nur für das Inverse der linearen Ausdehnung des Gitters möglich (s. Abb.6.3).

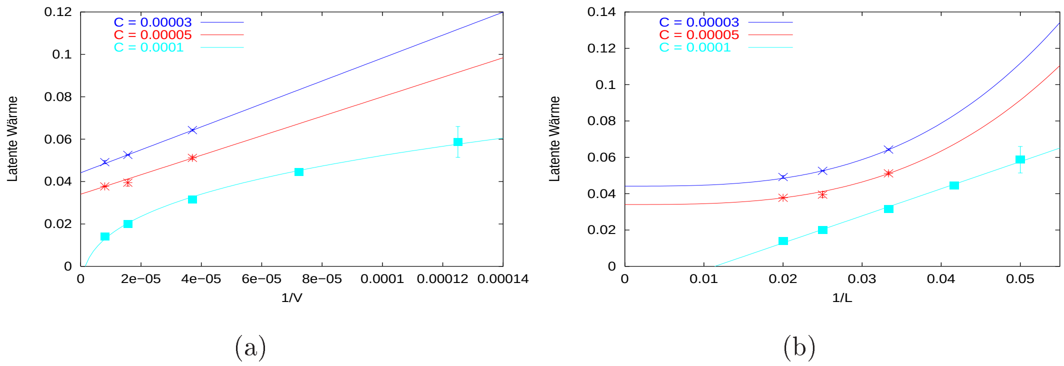


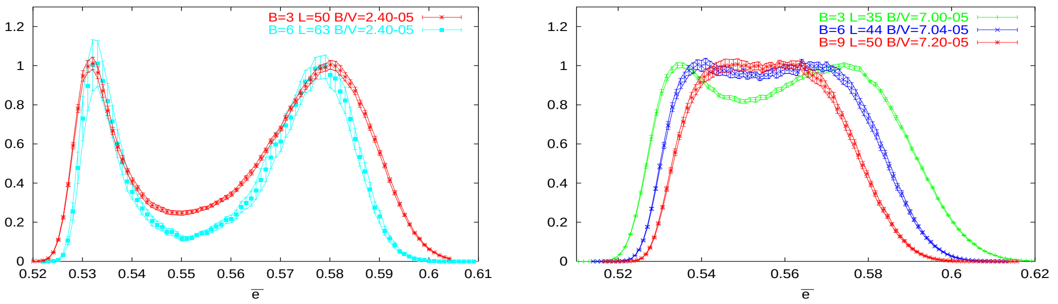
Abbildung 6.3: *Finite-Size-Effekte der latenten Wärme, geplottet gegen das Inverse des Volumens (a) und gegen das Inverse der Gittergröße L (b) .*

Für $C = 0.0001$ ist somit auch im thermodynamischen Limes keine latente Wärme mehr vorhanden. Somit kann dies als eine obere Grenze für den Phasenübergangsbereich erster Ordnung angesehen werden.

Für $C = 0.00003$ und $C = 0.00005$ verschwindet die latente Wärme im Rahmen dieser Analyse nicht. Weiterhin ist das Finite-Size Verhalten typisch für einen Phasenübergang erster Ordnung.

Die Güte des Finite-Size Scaling für $C = 0.00003$ und $C = 0.00005$ wird sicherlich durch die kleine Anzahl der verwendeten Gitter eingeschränkt. Weiterhin wären auch noch größere Gitter wünschenswert. Möglicherweise ist man für diese Größen der "Statischen Konstanten" auch noch nicht im asymptotischen Bereich, so daß sich bei noch größeren Gittern die Volumenabhängigkeit noch ändert. Andererseits, trotzdem die jackknife-ermittelten Fehler relativ klein sind, ergibt sich eine gute Übereinstimmung des Fits mit den Daten.

Abbildung 6.4 zeigt Histogramme der Energie der kanonischen Simulationen zu verschiedenen, relativ kleinen Quarkzahl-Volumenverhältnissen. Bei $B/V = 7 * 10^{-5}$ ist für die beiden kleineren Gitter, $L = 35,\ 44$ noch eine mehr oder weniger ausgeprägte Doppelpeakstruktur zu erkennen, für $L = 50$ hingegen ist jedoch lediglich nur ein relativ ebenes Plateau (mit im Vergleich zu Abb. 6.1.d. ca. mindestens doppelt so großer) endlicher Breite auszumachen. Betrachtet man das noch kleinere Quarkzahl-Volumenverhältnis $B/V = 2.4 * 10^{-5}$, so ist auch für $L = 50$ und $L = 63$ eine deutliche, auch für großkanonische Verhältnisse, für einen Phasenübergang erster Ordnung typische Doppelpeakstruktur auszumachen.



(a) $B/V = 2.4 * 10^{-5}$ (b) $B/V = 7.2 * 10^{-5}$

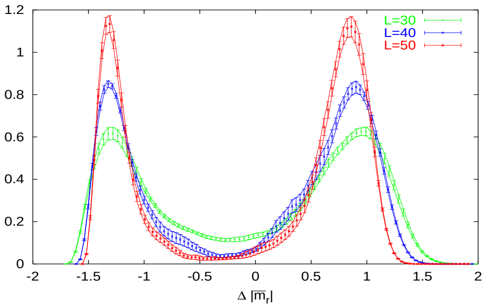
Abbildung 6.4: *Histogramme der Energie der kanonischen Simulationen zu verschiedenen Quarkzahl-Volumenverhältnissen. Angegeben sind weiterhin per Jackknife ermittelte Fehler.*

6.2 Oberflächenspannung

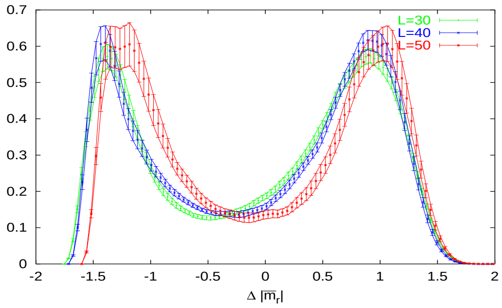
Wie in Abschnitt 4.5.1 beschrieben, ist ein weiterer Ansatz zur Bestimmung der Ordnung der Phasenübergänge die Analyse der Oberflächenspannung über die Verteilung des Ordnungsparameters. Wie auch für die Untersuchung der 2. Bindercumulante, müssen auch hier wieder mangels fehlenden Ordnungsparameters die entmischten, magnetisierungsartigen Observablen betrachtet werden.

Genau wie zur Analyse der latenten Wärme betrachtet man auch hier wieder mit Hilfe der Histogramm-Methode auf die Kopplung gleicher Peakhöhen umgewichtete Histogramme (s. Abb. 6.5).

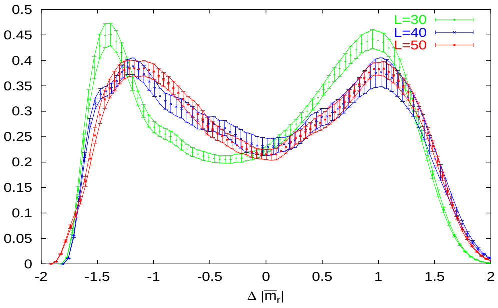
Trägt man den Logarithmus des Verhältnis von Dipminima und Peakmaxima gegen die Oberfläche auf, also $-1/2\ \ln(P_L^{min}(\mathcal{O})/P_L^{max}(\mathcal{O}))$ gegen L^2, s. Abb. 6.6.a, so folgt aus Gleichung (4.14), daß durch den Fit der Steigung die Oberflächenspannung in Einheiten der kritischen Temperatur gegeben ist. Diese ist direkt in Abb. 6.6.b dargestellt. Letztlich ergibt sich ein Verschwinden der Oberflächenspannung bei $C = 0.000035(\pm 0.00001)$. Es sei allerdings noch einmal erwähnt, daß diesem Verfahren ein Phasenübergang erster Ordnung zugrundeliegt und a priori direkt am kritischen Endpunkt bzw. im Crossoverbereich nicht mehr in dieser Form gültig ist und die entsprechenden Ergebnisse hier weiterer Korrekturen bedürfen. Insbesondere drückt sich dies in einer unphysikalischen negativen Oberflächenspannung für größere C aus. Weiterhin beruht der Fit für $C = 0.0001$ auf relativ kleinen, möglicherweise in Bezug auf die Oberflächenspannung noch nicht im asypmtotischen Volumenbereich liegenden Gittern, so daß die Aussagekraft dieses Wertes sicherlich begrenzt ist.



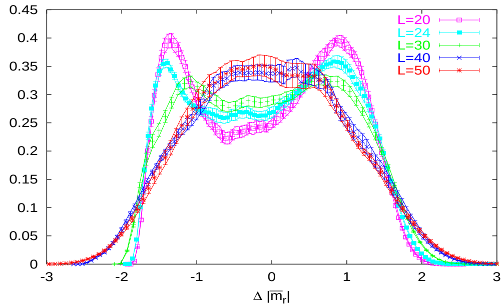
(a) $C = 0.00001$



(b) $C = 0.00003$

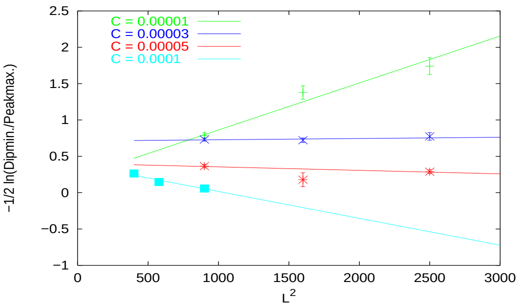


(c) $C = 0.00005$

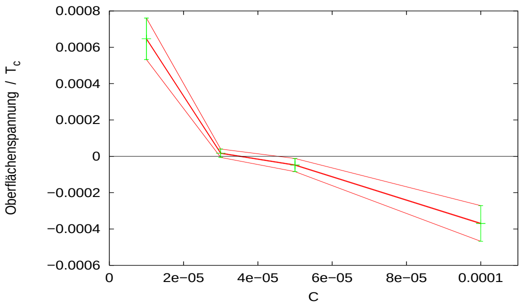


(d) $C = 0.0001$

Abbildung 6.5: *Histogramme der magnetisierungsartigen Observablen zu verschiedenen "Statischen Konstanten" auf jeweils mehreren Volumina. Angegeben sind weiterhin per Jackknife ermittelte Fehler .*

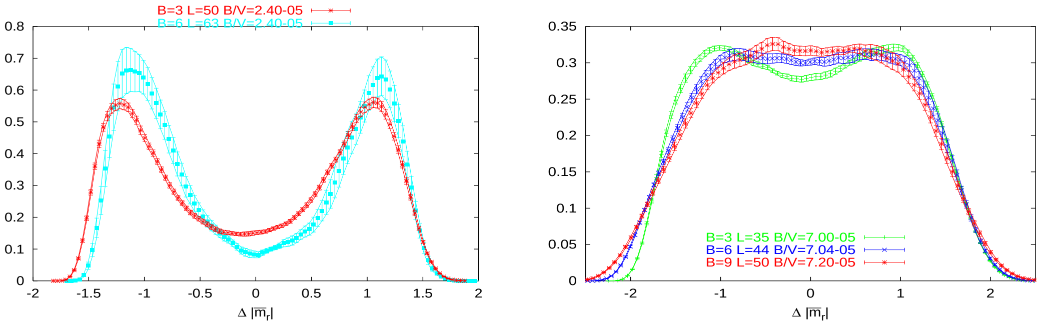


(a) -1/2 ln(Dipmin/Peakmax)



(b) Oberflächenspannung / T_c

Abbildung 6.6: *(a) Verhältnis von Dipminima und Peakmaxima gegen die Oberfläche, also $-1/2\ \ln(P_L^{min}(\mathcal{O})/P_L^{max}(\mathcal{O}))$ gegen L^2 zu verschiedenen "Statischen Konstanten" auf jeweils mehreren Volumina. (b) Oberflächenspannung in Einheiten der kritischen Temperatur gegen die "Statische Konstante".*



(a) $B/V = 2.4 * 10^{-5}$

(b) $B/V = 7.2 * 10^{-5}$

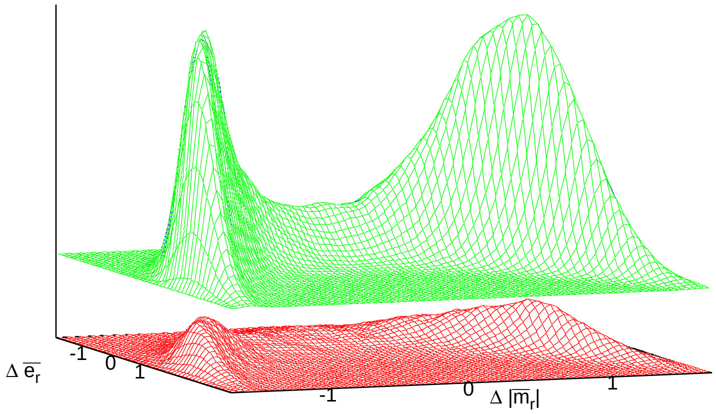
Abbildung 6.7: *Histogramme kanonischer Simulationen der magnetisierungsartigen Observablen zu verschiedenen Quarkzahl-Volumenverhältnissen. Angegeben sind weiterhin per Jackknife ermittelte Fehler.*

Zur Analyse wurde auch hier wieder das für die latente Wärme beschriebene Glättungs- und Interpolationsverfahren benutzt und so Jackknifefehler für die extrahierten Werte erzeugt. Diese wurden dann auch beim Fit der Steigung durch Gnuplot verwendet.

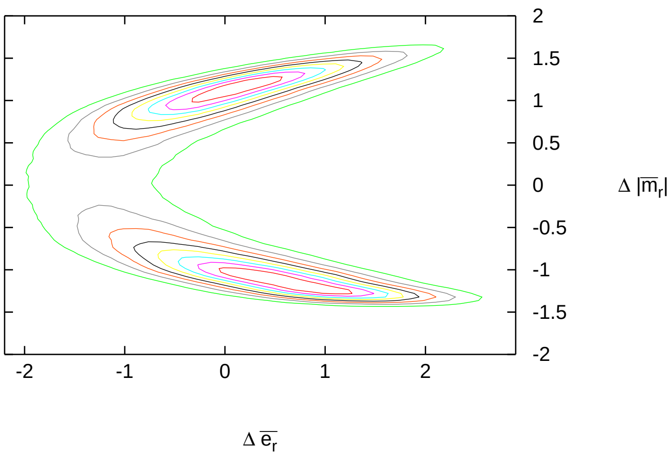
In Abbildung 6.7 sind zum Vergleich Histogramme kanonischer Simulationen der magnetisierungsartigen Observablen zu verschiedenen, den Quarkzahl-Volumenverhältnisse der Histogramme der Energie der kanonischen Simulatonen in Abb. 6.4 entsprechenden Dichten gezeigt. Analog zu diesen verschwindet die noch bei den beiden kleineren Gittern schwach vorhandene Doppelpeakstruktur bei $L = 50$ für $B/V = 7 * 10^{-5}$. Bei gleichem Volumen, aber $B/V = 2.4 * 10^{-5}$ ist sie aber sehr deutlich ausgeprägt. Vergleicht man dieses Histogramm mit dem des doppelten Volumen entsprechenden, $L = 63$, so zeigt sich tendenziell das für diskontinuierliche Phasenübergänge typische anwachsen des Verhältnisses von Peakmaxima zu Dipminima mit größer werdenden Gittern. Dies ist möglicherweise als ein Anzeichen für die Abschwächung der Dominanz der Dichteeffekte zu deuten.

6.3 Universalitätsklasse

Betrachtet man die, entsprechend Abschnitt 4.6 um den kritischen Endpunkt für $C = 0.00003$ und $C = 0.00005$ erzeugten, auf Varianz eins normierten und auf den Mittelpunkt zentrierten, gemeinsamen Histogramme der energie- und magnetisierungsartigen Observablen, so ergibt sich im Vergleich mit Abbildung 4.1 ein starker qualitativer Hinweis auf die Ising Universalitätsklasse. Analog zu einem Fehlerband ist in den 3-D Plots der Abbildungen 6.8 und 6.9 das Doppelte des Jackknifefehlers (in rot) unter das eigentliche Histogramm miteingezeichnet. Gleiches gilt auch für die Abb. 6.10 und 6.11 der Histogramme der kanonischen Simulationen für $B/V = 7.2 * 10^{-5}$ und $B/V = 2.4 * 10^{-5}$. Insbesondere letzteres weist die für die Ising Universalitätsklasse typische Verteilung am kritischen Endpunkt auf. Allerdings sind aufgrund der unterschiedlichen Übergangscharakteristika beider Ansätze die Verteilungen nicht direkt zu vergleichen. Insbesondere ist im kanonischen Ansatz bei gleichen Dichten aufgrund des flacheren Übergangs stets mit, im Vergleich zum großkanonischen Ansatz relativ häufig auftretenden, aus beiden Phasen gemischten Konfiguration zu rechnen.

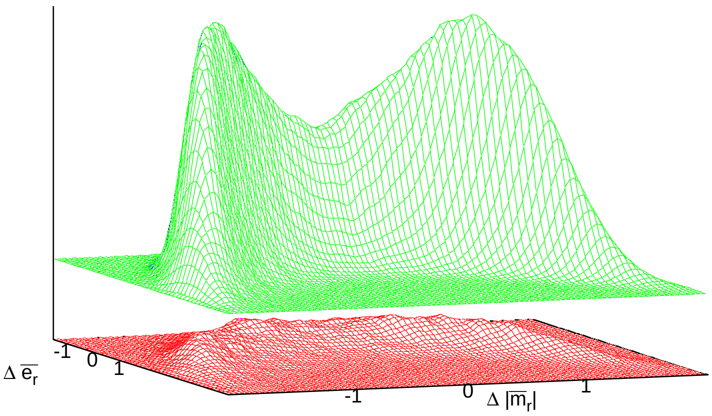


(a) 3d-Plot

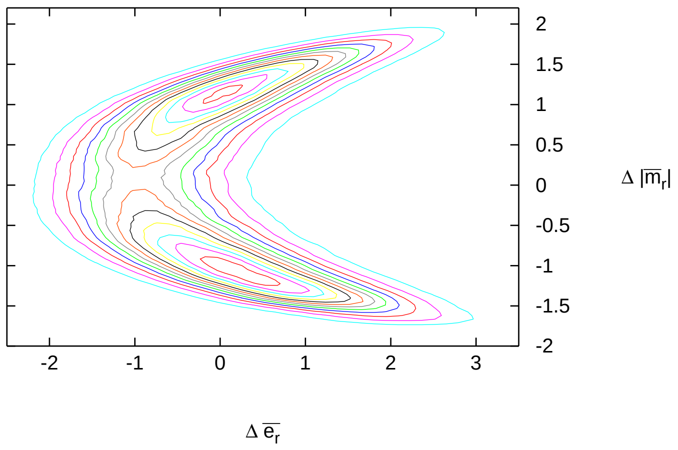


(b) Contour

Abbildung 6.8: *normierte und zentrierte Histogramme der energie- und magnetisierungsartigen Observablen,* $C = 0.00003$, $L = 50$.

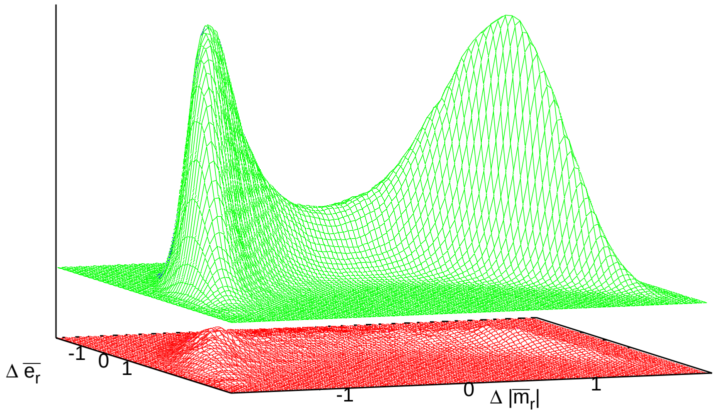


(a) 3d-Plot

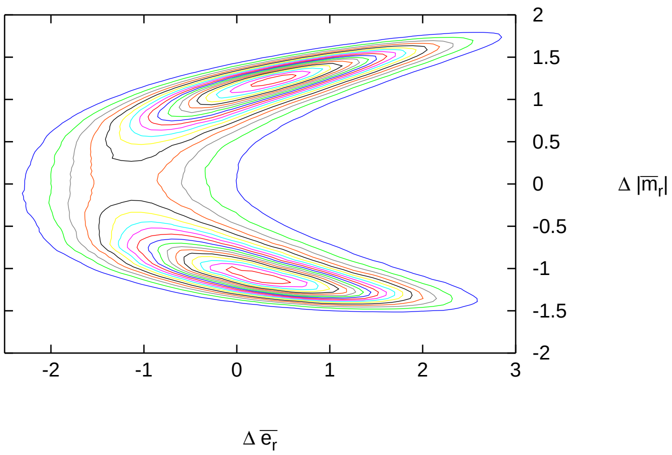


(b) Contour

Abbildung 6.9: *normierte und zentrierte Histogramme der energie- und magnetisierungsartigen Observablen,* $C = 0.00005$, $L = 50$.

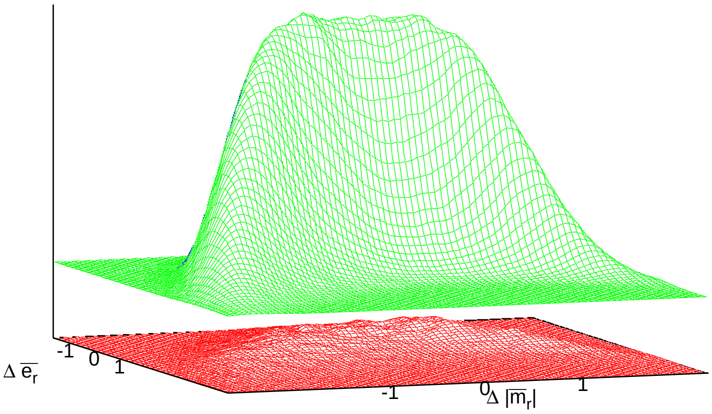


(a) 3d-Plot

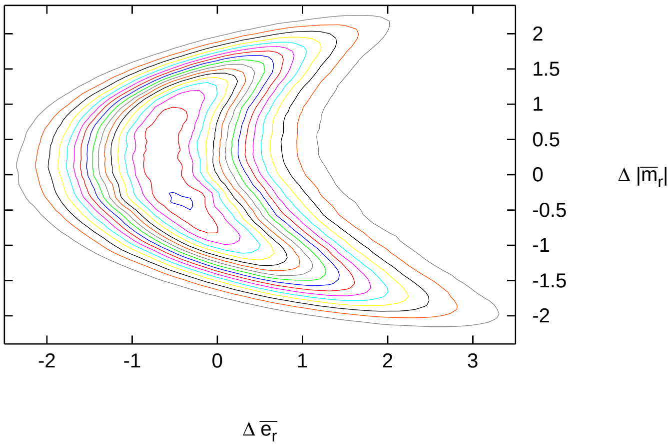


(b) Contour

Abbildung 6.10: *normierte und zentrierte Histogramme der energie- und magnetisierungsartigen Observablen,* $2.4 * 10^{-5} B/V,\ L = 50$.



(a) 3d-Plot



(b) Contour

Abbildung 6.11: *normierte und zentrierte Histogramme der energie- und magnetisierungsartigen Observablen,* $7.2 * 10^{-5} B/V,\ L = 50$.

Kapitel 7

Zusammenfassung

Nachdem aus der kanonischen Beschreibung der QCD bei endlicher Quarkdichte und statischen Quarks die kanonische sowie die großkanonische Formulierung im Grenzfall hoher Temperaturen und geringer Dichten entwickelt worden ist, konnten die Simulationen mit einem erweiterten dreidimensionalen 3-Zustands-Pottsmodell durchgeführt werden.

In beiden Ansätzen wurden die Variation des Vorzeichens in Abhängigkeit der Kopplung β, des Quarkzahl-Volumenverhältnisses B/V bzw. der "Statischen Konstante" C und des Volumens V analysiert. In Verbindung mit der Analyse der spezifischen Wärme und den Suszeptibilitäten stellte sich heraus, daß die Fluktuationen des Vorzeichens am Phasenübergangspunkt bzw. am Crossoverpunktes zwar vorhanden, in dem Simulationbereich, der sich über mehrere Größenordnungen von B/V bzw. C erstreckt, aber handhabbar sind. Insgesamt hat diese Arbeit gezeigt, daß beide Ansätze geeignet sind, trotz des Vorzeichenproblems Phasenübergänge zu untersuchen. Insbesondere bieten sie eine recht effiziente Möglichkeit, den Phasenübergangsbereich erster Ordnung zu analysieren.

In der ungeordneten Phase fällt der Erwartungswert des Vorzeichens im Kanonischen allerdings exponentiell mit dem Volumen und der Kopplung ab und der zu untersuchende Bereich ist hier durch das Vorzeichenproblem begrenzt. Im Großkanonischen ergibt sich ein in der Nähe der kritischen Kopplung, vorwiegend in der ungeordneten Phase, mit wachsendem Volumen V bzw. größer werdender "Statischer Konstante" C immer stärker ausgeprägter Dip. In dieser Formulierung können auch Bereiche sehr kleiner Kopplungen (aber dadurch geringer Dichten) untersucht werden. In beiden Formulierung begrenzt das Vorzeichenproblem somit Untersuchungen bei kleineren Kopplungen β aber gleichwohl vorhandenen Dichten gewisser Größe auf bestimmte Volumina. In der geordneten Phase sind die negativen Beiträge zum Erwartungswert des Vorzeichens nicht relevant.

Vergleicht man die Simulation der QCD bei endlicher Quarkdichte und statischen Quarks mit den in diesem Limes mittels des Pottsmodells durchgeführten Simulationen, so zeigt sich eine gute qualitative Übereinstimmung.

Betrachtet man die Ergebnisse des kanonischen Ansatzes, so ist auch im Grenzfall hoher Temperaturen und geringer Quarkzahl-Volumenverhältnisse mit wachsender endlicher Dichte eine deutliche Verbreiterung des Überganges und eine kleiner werdende kritische Kopplung festzustellen. Im wesentlichen scheint das Verhalten von dem Quarkzahl-Volumenverhältnis dominiert zu werden, insgesamt sind nur wenig Volumeneffekte auszumachen.

In beiden Ansätzen bleibt der Erwartungswert der Magnetisierung in Analogie zum Verhalten des Polyakov Loops, der aufgrund der Abschirmeffekte statischer Quellen nicht verschwindet, auch bei kleiner werdender Kopplung endlich.

Im Großkanonischen zeigt sich ebenfalls mit größer werdender "Statischer Konstante" C eine, wenn auch viel schwächer ausgeprägte, Verbreiterung des Übergangbereiches, auch hier wird infolgedessen der Wert der kritische Kopplung kleiner. Allerdings zeigen sich deutlich Bereiche, in denen die Peakhöhen mit dem Volumen skalieren und es läßt sich ein Phasenübergangsbereich erster Ordnung ausmachen. Aufgrund diesen Krititeriums läßt sich der kritische Endpunkt $C_{kritisch}$ auf $[0.00003, 0.0001]$ eingrenzen.

Ein solcher Bereich läßt sich auch durch Transformation der Energie und Magnetisierung zu voneinander unkorrelierten Größen, einem neuen magnetisierungsartigen Ordnungsparameter und einer energieartigen Observable, ausmachen. Wählt man den Schnittpunkt der 2. Bindercumulanten der magnetisierungsartigen Observablen als Kennzeichen für den kritischen Endpunkt, so liegt die entsprechende "Statische Konstante $C_{kritisch}$ innerhalb $[0.00003, 0.00005]$. Mit $B^4_{r,\bar{m}} = 1.59(20)$ am Schnittpunkt, $C = 0.000041$, ist ein erster Hinweis auf die Ising-Universalitätsklasse (1.604(1)) gegeben. Die Unniversalitätsklassen der Gruppen $O(2)$ und $O(4)$ können ausgeschlossen werden. Eine qualitative Bestätigung dieser Universalitätsklasse liefert auch der Vergleich der kombinierten Verteilungen der energie- und magnetisierungsartigen Observablen mit den für obige Gruppen charakteristischen Verteilungen. Durch die Bestimmung der Oberflächenspannung mittels der Verteilung der magnetisierungsartigen Observable ergibt sich für den kritischen Endpunkt ein Wert von $C_{kritisch} = 0.000035(10)$. Dieser wurde aber mit einem Verfahren bestimmt, das am kritischen Endpunkt noch weiterer Finite-Size Korrekturen bedürfte.

Die den Phasenübergang erster Ordnung charakterisierende latente Wärme, bestimmt über die Verteilung der Energie, verschwindet innerhalb $C_{kritisch} \in [0.00005, 0.0001]$.

Als schwierig stellt sich aufgrund jeweils verschiedener Finite-Size-Effekte und notwendigerweise in einem mehrdimensionalen Kopplungsraum stattfindendem Finite-Size-Scaling die genaue Übertragung der großkanonischen Ergebnisse auf die kanonischen Simulationen zwischen zwei endlichen Systemen heraus. Insbesondere ist der Erwartungswert der Quarkzahl sehr sensitiv gegenüber der Kopplung β. Als konservative Schätzung läßt sich aber aufgrund der großkanonischen Simulationen von einem Erwartungswert von $\langle B/V \rangle = 12 * 10^{-5}$ ausgehen, bei dem noch ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt. Somit ist es zwar möglich, die weitgehende Volumenunabhängigkeit der Werte der größeren Dichten durch ein Crossoververhalten zu begründen, die Untersuchung der Volumenabhängigkeit der Extremalwerte für $B/V = 7 * 10^{-5}$ weisen aber ebenfalls auf abnehmende Volumeneffekte hin. Insgesamt zeigt sich mit wachsender Dichte ein schon bei immer kleineren Gittern einsetzendes Verschwinden der Volumeneffekte.

Letztlich sind aber größere Gitter notwendig, um den Phasenübergangsbereich erster Ordnung besser zu untersuchen, insbesondere um auch in diesem Bereich mehr Stützstellen zu erzeugen und um auch hier das abklingen der Volumeneffekte im kanonischen Ansatz zu manifestieren.

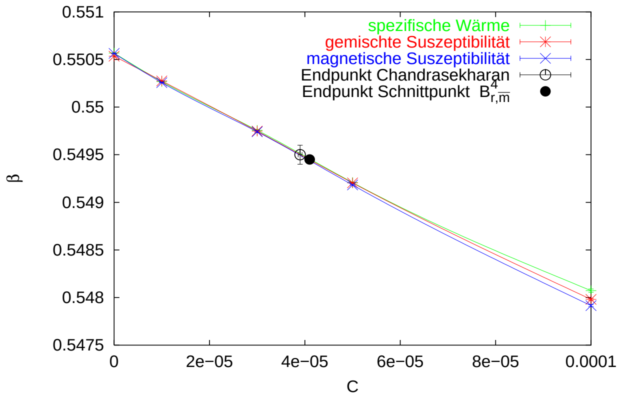


Abbildung 7.1: *Phasendiagram in der $\beta - C$-Ebene, $L = 50$. Weiterhin ist der mit Hilfe des Schnittpunktes der Bindercumulanten $B^4_{r,\bar{m}}$ bestimmte Endpunkt bei $C = 0.000041$, $\beta = 0.54945$ angegeben. Zum Vergleich ist der von S. Chandrasekharan et al. [37] bestimmte Endpunkt $C = 0.000039$, $\beta = 0.5495$ eingetragen. Das Verhältnis von $\Delta(12C)/\Delta\beta$ entspricht hier -0.434 (Chandrasekharan: -0.430(6)). (Es sei noch einmal erinnert, daß die hier verwendete Kopplung dem zwölffachen der "Statischen Konstante" entspricht.)*

Nicht-Cluster Algorithmen wie der Heatbath sind insbesondere für relativ kleine Gitter geeignet, für recht große Gitter sind Clusteralgorithmen Voraussetzung für effiziente Simulationen. Analysen verschiedener Clusteralgorithmen wie z.B. des Wolff-Algorithmus verboten allerdings deren Implementierung aufgrund des nichtlokalen Charakters von $\hat{f}_B$ bzw. $\hat{f}_C$. Durch Modifikation des Swendsen-Wang Algorithmus und einem etwas anderem Zugang zur QCD mit schweren Quarks konnten S. Chandrasekharan, U. J. Wiese et al. [38] im großkanonischen Ansatz einen Cluster-Algorithmus für das Pottsmodell entwickeln, der durch Mittelung der drei möglichen Zustände eines Clusters positiv definite Gewichte für einen Cluster erzeugt und somit negative Beiträge zum Erwartungswert vermeidet. Da sich der kritische Endpunkt aber bei relativ kleiner "Statischer Konstante" befindet stellte sich zur Untersuchung des Phasenübergangsbereiches erster Ordnung für Gitter mit $L < 100$ ein gewichteter Metropolis-Algorithmus unter Inkaufnahme des Vorzeichenproblems aufgrund der recht zeitintensiven Entscheidung, einen Bond zu setzen, und des *super-kritischen slowing downs* an der Phasenübergangslinie allerdings als effizienter heraus. Letzteres Problem versucht Rummukainen [39] durch eine Kombination von Clusteralgorithmen und multikanonischen Methoden von Berg und Neuhaus [40] anzugehen. In der Zukunft gilt es also, einen entsprechend effektiven Algorithmus zu finden.

Mit größeren Arbeitsspeichern wird in naher Zukunft auch eine Implementierung der Multihistogramm-Methode möglich, die durch gleichzeitiges Umgewichten auf andere Kopplungen β und andere "Statische Konstanten" C (bzw. andere Quarkzahl-Volumenverhältnisse) die Fehler der Simulationen stark reduziert. Somit wird inbesondere eine wesentlich genauere Bestimmung des kritischen Endpunktes möglich.

Danksagung

Zuerst möchte ich mich an dieser Stelle für die gesamte Betreuung dieser Abeit, für die vielen Ideen und Denkansätze, bei Prof. Dr. Fritjof Karsch bedanken.

Weiterhin gilt mein Dank Prof. Dr. Jürgen Engels für seine Diskussions- und Hilfsbereitschaft sowie die gründliche Besprechung dieser Arbeit.

Der gesamten Arbeitsgruppe möchte ich für all die kleinen, aber doch so wichtigen Gespräche am Rande danksagen, den Gedankenaustausch, die zweite Meinung, die Tips. Mein besonderer Dank gilt hier der engen Zusammenarbeit mit Dr. Olaf Kaczmarek, die sich aufgrund seiner analogen Untersuchungen in der QCD ergab. Dr. Konstantin Petrov gebührt Dank für die nette Atmosphäre in unserem Büro.

Besonderen Dank all denen, die mich im Studium stets begleitet haben und wirklich immer da waren, meinen Eltern und meinen Freunden.

Dank denen, die die Leidenschaft zur Natur entfachten.

Erklärung

Hiermit versichere ich, vorliegende Arbeit mit keinen weiteren als denen im Literaturverzeichnis angegebenen Hilfsmitteln angefertigt zu haben.

Olaf Leonhard

Literaturverzeichnis

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

[2] M. Creutz. *Quarks, gluons and lattices*. Cambridge University Press, 1983.

[3] H.J.Rothe. *Lattice gauge theories - an introduction*. World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hongkong, second edition, 1997.

[4] G. Münster I. Montvay. *Quantum fields on a lattice*. Cambridge University Press, 1994.

[5] P. Hasenfratz and F. Karsch. Chemical potential on the lattice. *Phys. Lett.*, B125:308, 1983.

[6] C.E.Detar T.A.Degrand. Phase structure of qcd at high temperature with massive quarks and finite quark density:A Z(3) paradigm. *Nuclear Physics B225 (1983) 590-620*, 1983.

[7] David E. Miller and Krzysztof Redlich. Exact implementation of baryon number conservation in lattice gauge theory. *Phys. Rev.*, D35:2524, 1987.

[8] Peter Braun-Munzinger. Towards the quark-gluon plasma. *Nucl. Phys.*, A663:183, 2000.

[9] A.L.Fetter and J.D.Walecka. Quantum theory of many-particle systems. *McGraw-Hill*, 1971.

[10] M. A. Halasz, A. D. Jackson, R. E. Shrock, M. A. Stephanov, and J. J. M. Verbaarschot. On the phase diagram of QCD. *Phys. Rev.*, D58:096007, 1998.

[11] L. P. Csernai and J. I. Kapusta. Entropy and cluster production in nuclear collisions. *Phys. Rept.*, 131:223, 1986.

[12] S. P. Klevansky. The nambu-jona-lasinio model of quantum chromodynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 64:649, 1992.

[13] M. A. Stephanov. Random matrix model of qcd at finite density and the nature of the quenched limit. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4472–4475, 1996.

[14] A.Peikert. *QCD thermodynamics with 2+1 quark flavours in lattice simulation.* PhD thesis, University of Bielefeld, 2000.

[15] Robert D. Pisarski and Frank Wilczek. Remarks on the chiral phase transition in chromodynamics. *Phys. Rev.*, D29:338–341, 1984.

[16] Mark G. Alford. Color superconducting quark matter. *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, 51:131–160, 2001.

[17] J. Engels, O. Kaczmarek, F. Karsch, and E. Laermann. The quenched limit of lattice qcd at non-zero baryon number. *Nucl. Phys.*, B558:307–326, 1999.

[18] Benjamin Svetitsky and Laurence G. Yaffe. Critical behavior at finite temperature confinement transitions. *Nucl. Phys.*, B210:423, 1982.

[19] B. Berg, J. Engels, E. Kehl, B. Waltl, and H. Satz. Critical behavior in baryonic matter. *Z. Phys.*, C31:167, 1986.

[20] Olaf Kaczmarek, Frithjof Karsch, Edwin Laermann, and Martin Lutgemeier. Heavy quark potentials in quenched qcd at high temperature. *Phys. Rev.*, D62:034021, 2000.

[21] Z.W. Salsburg, J.D. Jacobson, W. Fickett, and W.W. Wood. bbbbbx. *J. Chem. Phys.* **30***, 65 (1959)*, 65:30, 1959.

[22] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2635–2638, 1988.

[23] R. H. Swendsen. Modern methods of analyzing monte carlo computer simulations. *Physica A*, 53:194, 1993.

[24] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen. Optimized monte carlo analysis. *Computer in Physics*, Sept/Oct:101–104, 1989.

[25] J. P. Valleau and D. N. Card. *J. Chem. Phys.*, 57:5457, 1972.

[26] C. H. Bennett. *J. Comput. Phys.*, 22:245, 1976.

[27] A.N. Berker and M.E. Fisher. Scaling of first - order phase transitions in thermodynamic and finite systems. *Phys. Rev.*, B26:2507, 1982.

[28] Murty S. S. Challa, D. P. Landau, and K. Binder. Finite size effects at temperature driven first order transitions. *Phys. Rev.*, B34:1841–1852, 1986.

[29] K. Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution funct ions. *Z. Phys. B - Condens. Matter*, 43:119, 1981.

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

[31] Wolfhard Janke and Ramon Villanova. Three-dimensional 3-state potts model revisited with new techniques. *Nucl. Phys.*, B489:679–696, 1997.

[32] K. Rummukainen, M. Tsypin, K. Kajantie, M. Laine, and Mikhail E. Shaposhnikov. The universality class of the electroweak theory. *Nucl. Phys.*, B532:283–314, 1998.

[33] O.Kaczmarek. *The heavy quark mass limit of QCD at non-zero baryon number density.* PhD thesis, University of Bielefeld, 2000.

[34] Henk W. J. Blöte, Erik Luitjen, and Jouke R. Heringa. Ising universality in three dimensions: A monte carlo study. 1995.

[35] K. Kanaya and S. Kaya. Critical exponents of a three dimensional o(4) spin model. *Phys. Rev.*, D51:2404–2410, 1995.

[36] A. P. Gottlob and M. Hasenbusch. Critical behaviour of the 3d xy-model: A monte carlo study. 1993.

[37] Shailesh Chandrasekharan. Qcd at a finite density of static quarks. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 94:71–78, 2001.

[38] Mark G. Alford, S. Chandrasekharan, J. Cox, and U. J. Wiese. Solution of the complex action problem in the potts model for dense qcd. *Nucl. Phys.*, B602:61–86, 2001.

[39] K. Rummukainen. Multicanonical cluster algorithm and the 2-d seven state potts model. *Nucl. Phys.*, B390:621–636, 1993.

[40] Bernd A. Berg and Thomas Neuhaus. Multicanonical algorithms for first order phase transitions. *Phys. Lett.*, B267:249–253, 1991.