Spektralfunktionen im linearen Sigma-Modell.

Diplomarbeit

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Volker Pankoke

4.September 2002

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

In der Quantenchromodynamik (*QCD*) werden zwei Phasenübergänge häufig untersucht. Zum einen der Übergang vom *Confinement* zum *Deconfinement*, und zum anderen der Übergang von einer chiral symmetrischen Phase zu einer Phase in der die chirale Symmetrie gebrochen ist. In der Natur ist die starke Wechselwirkung durch die Wechselwirkungen zwischen Hadronen bestimmt. Die *QCD* ist jedoch keine Theorie von Hadronen, sondern von Quarks und Gluonen. Wobei die Gluonen die Eichbosonen der starken Wechselwirkung sind. Es werden sechs Arten von Quarks unterschieden, die so genannten Flavours u, d, s, c, t und b. Eine Eigenschaft der Quarks ist die Farbladung, die aus den Symmetrien der starken Wechselwirkung folgt. Es existieren drei verschiedene Farbladungen, und deren Antiladungen für die Antiteilchen. Die Gluonen besitzen ebenfalls eine Farbladung, was zu einer Selbstwechselwirkung in der *QCD* führt. Die in der Natur vorkommenden Hadronen sind stets farblos. Das Potential zwischen Teilchen, die eine Farbladung tragen, steigt linear mit ihrem Abstand. Die Quarks sind wegen dieser Eigenschaft der Wechselwirkung in den Hadronen gefangen, was als *Confinement* bezeichnet wird. Um ein Quark aus einem Hadron zu entfernen, wird daher eine unendlich große Energiemenge benötigt. Mit steigendem Abstand wird die Energie so groß, dass sich bei der Trennung zwischen dem Quark und dem Rest des Hadrons ein weiteres Quark-Antiquarkpaar bilden kann, was energetisch günstiger ist. Auf diese Weise entstehen wiederum zwei farblose Hadronen. Für hohe Dichten und Temperaturen, die zu kleinen Abständen zwischen den Quarks führen, können sich die Quarks relativ frei bewegen, was auch als asymptotische Freiheit bzw. *Deconfinement* bezeichnet wird. Es wird vermutet, dass in der Anfangsphase des Universums ein solcher Zustand, der auch Quark-Gluonen-Plasma genannt wird existiert haben muss. Im heutigen Universum ist es möglich, dass dieser Zustand im inneren von dichten Neutronensternen existiert, oder im frühen Stadium einer Supernova Explosion [4]. Mit der Ausdehnung und der damit verbundenen Abkühlung des Universums, kam es dann jedoch zu einem Phasenübergang und die Materie hadronisierte. Der Phasenübergang zwischen der chiral symmetrischen und der gebrochenen Phase ist interessant, weil er die Existenz des Pions, das die Phänomene der Hadronenphysik bei niedrigen Energien beschreibt, erklärt [6]. Wie auch der Übergang vom *Confinement* zum *Deconfinement*, so wird auch dieser Phasenübergang hauptsächlich durch die Temperatur und die Baryonendichte beschrieben. Die Art des Phasenübergangs, hängt in diesem Fall jedoch stark von den Quarkmassen ab. Für kleine *strange* Quarkmassen ist der Phasenübergang erster Ordnung, für große jedoch zweiter Ordnung. Es kommt hierbei darauf an, inwieweit das *strange* Quark zum Vakuum der *QCD* beiträgt. Das Vakuum der *QCD* wird durch ein Kondensat von Quark-Antiquarkpaaren beschrieben $\langle \bar{q}q \rangle$, dessen Auftreten analog zum Auftreten der Cooperpaare in der Theorie der Supraleitung ist. Aus den unterschiedlichen Massen m_s folgen unterschiedliche Annahmen über die chirale Symmetrie. So ergibt sich aus der Annahme $m_s = 0$ eine $SU_L(3) \times SU_R(3)$ und aus der Annahme $m_s = \infty$ eine $SU_L(2) \times SU_R(2)$-Symmetrie [6]. Das Vakuum der *QCD*, das mit Hilfe von Gitterrechnungen untersucht wurde, unterscheidet sich vollständig von störungstheoretischen Ansätzen. Tatsächlich wird das Vakuum der *QCD* wesentlich durch die genannten Phasenübergänge bestimmt. Für zwei masselose Quarks bei endlicher Temperatur und verschwindender Baryonendichte, lässt sich der chirale Phasenübergang durch ein effektives, $O(4)$ symmetrisches Modell beschreiben. Das chirale Kondensat wird dann durch drei Pionen und das σ-Meson beschrieben. In der symmetrischen Phase verschwindet das chirale Kondensat, während es in der gebrochenen Phase einen endlichen Wert annimmt. Die Pionen sind aus Theorie und Experiment hinlänglich bekannt. Anders verhält es sich mit dem σ-Meson, das experimentell noch nicht nachgewiesen werden konnte. Eine der wichtigsten Größen, an der sich Eigenschaften des σ-Mesons und der Pionen bestimmen lassen, sind die Spektralfunktion. Untersuchungen der Spektralfunktionen der Teilchen des chiralen Phasenübergangs wurden bereits in [1, 6, 7, 8] durchgeführt. Das σ-Meson gleicht in der gebrochenen Phase eher einer breiten Resonanz. Die entscheidende Observable, um Spektralfunktionen aus Gittersimulationen berechnen zu können, ist Die Korrelationsfunktion, die in Simulationen einfach berechnet werden kann. Ein weiterer Vorteil in der Untersuchung von Spektralfunktionen, besteht darin, dass Spektralfunktionen direkt in Experimenten gemessen werden können. Zur Berechnung der Spektralfunktionen aus den Korrelations funktionen wird in dieser Arbeit die *Maximum Entropie Methode* angewendet. Diese Arbeit ist wie folgt aufgebaut, in Kapitel 1 wird zunächst der fermionische Anteil der *QCD*-Lagrangefunktion eingeführt, sowie dessen Symmetrien und Erhaltungsgrößen. Danach werden die Goldstonebosonen eingeführt, und die Eigenschaften der Teilchen des chiralen Phasenübergangs erläutert. Im letzten Teil des ersten Kapitels wird der Übergang zum effektiven Modell der *QCD* beschrieben, und das lineare Sigma Modell eingeführt. Das zweite Kapitel beschreibt die *Maximum Entropie Methode* . Im dritten Kapitel werden die numerischen Methoden vorgestellt, die zur Berechnung der Korrelationsfunktionen verwendet werden. Im letzten Kapitel werden die aus den Simulationen gewonnenen Korrelationsfunktionen und die daraus bestimmten Spektralfunktionen ausgewertet. Anschließend werden die Spektralfunktionen aus den Korrelationsfunktionen verschiedener Gittergröße verglichen.

Kapitel 1

Der chirale Phasenübergang

Bei der Diskussion des chiralen Phasenübergangs der QCD, können für niedrige Energien alle Quarks bis auf die leichtesten, (das u-,d- und das s-Quark,) ignoriert werden. Das strange Quark ist dann immer noch wesentlich schwerer als die beiden leichtesten Quarks, $\frac{m_s}{m_d} = 18.9 \pm 0.8$ [6]. Die Art des Phasenübergangs und die Symmetrie eines effektiven Modells hängen davon ab, inwieweit die Masse des strange Quarks berücksichtigt wird (siehe Abbildung 1.1). Für den Fall $m_s = \infty$ verschwinden die strange Quark Felder vollständig aus der Lagrangefunktion. Der fermionische Anteil der Lagrangedichte ergibt sich dann zu,

$$\mathcal{L} = \bar{u} i \not{D} u + \bar{d} i \not{D} d - m_u \bar{u} u - m_d \bar{d} d. \tag{1.1}$$

Da die Massen von u- und d-Quark klein sind gegenüber typischen Skalen der QCD, können die letzten beiden Terme ebenfalls vernachlässigt werden. In diesem Fall ist die Isospinsymmetrie erfüllt*, und die Lagrangefunktion ist symmetrisch unter der Transformation

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \longrightarrow U \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \tag{1.2}$$

die die u- und d-Felder mischt. U ist hierbei eine unitäre Matrix der Gruppe $SU(2) \times U(1) = U(2)$. Für masselose Quarks sind diese Symmetrien unabhängig sowohl für links- als auch rechtshändige Quarks erfüllt, da in der Lagrangefunktion keine weiteren Terme vorkommen, die die unterschiedlichen Helizitäten koppeln. Die gesamte Symmetriegruppe lässt sich dann in eine vektorielle $SU(2) \times U(1)$ und eine axial vektorielle $SU(2) \times U(1)$ Transformation zerlegen, wobei die vektoriellen Transformationen bekannte Symmetrien der QCD sind. Die dazu zugehörigen Ströme lassen sich schreiben als,

$$j^\mu = \bar{q}_R \gamma^\mu q_R + \bar{q}_L \gamma^\mu q_L \tag{1.3}$$

$$j^{\mu a} = \bar{q}_R \gamma^\mu \tau^a q_R + \bar{q}_L \gamma^\mu \tau^a q_L \tag{1.4}$$

*wie auch für die Annahme $m_u = m_d$

mit,

$$q_R = \begin{pmatrix} u_R \\ d_R \end{pmatrix} = \left(\frac{1+\gamma^5}{2}\right) \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \quad q_L = \begin{pmatrix} u_L \\ d_L \end{pmatrix} = \left(\frac{1-\gamma^5}{2}\right) \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \tag{1.5}$$

und τ^a als Generatoren der $SU(2)$. Diese Ströme repräsentieren die Baryonen-Zahl und den Isospinstrom. Für die axialen Vektorsymmetrien ergeben sich die Ströme,

$$j^{\mu 5} = \bar{q}_R \gamma^\mu \gamma^5 q_R - \bar{q}_L \gamma^\mu q_L = \bar{q} \gamma^\mu \gamma^5 q \tag{1.6}$$

$$j^{\mu 5a} = \bar{q}_R \gamma^\mu \tau^a q_R - \bar{q}_L \gamma^\mu \tau^a q_L = \bar{q} \gamma^\mu \gamma^5 \tau^a q. \tag{1.7}$$

In der klassischen Feldtheorie sind auch die axialen Vektorsymmetrien Symmetrien der starken Wechselwirkung, was jedoch nicht für die *QCD* gelten muss, da Strahlungskorrekturen in der Quantenfeldtheorie einen entscheidenden Einfluss auf die Wechselwirkungen haben können, und sogar Symmetrien der Lagrangefunktion zerstören. Im Falle des axialen Vektorstroms wird dies als *Adler-Bell-Jackiw* Anomalie bezeichnet [2]. Um zu prüfen, ob diese Anomalie in der *QCD* auftritt, betrachtet

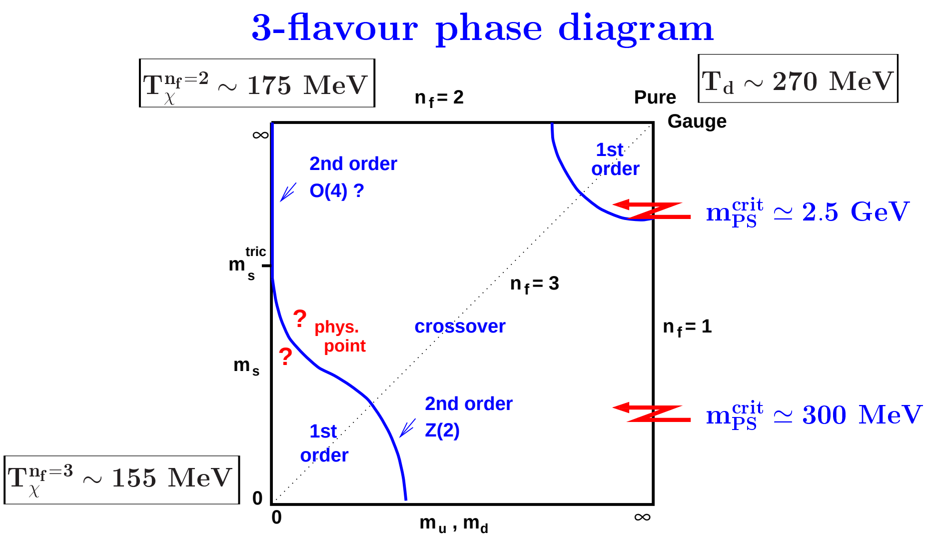

Abbildung 1.1: Phasendiagramm der Massen m_d,m_u und m_s [4].

man die Ableitungen der axialen Ströme ((1.6),(1.7)), die für eine echte Symmetrie verschwinden sollten. Der axiale Isotriplettstrom $j^{\mu 5a}$ ist erhalten und ergibt sich zu einer echten Symmetrie der *QCD*, die allerdings spontan gebrochen ist [3]. Dies gilt jedoch nicht für die axiale Isospinsinglett-Symmetrie, da sich in der Störungstheorie explizit zeigen lässt [2], dass

$$\partial_\mu j^{\mu 5} = -\frac{g^2 n_f}{32\pi^2} \epsilon^{\alpha\beta\mu\nu} F^c_{\alpha\beta} F^c_{\mu\nu} \neq 0. \tag{1.8}$$

Die Symmetrie der *QCD*, die in dieser Arbeit untersucht werden soll, ergibt sich damit zu $SU(2)\times SU(2)\times U(1)$, wovon die zum Isotriplett $j^{\mu 5a}$ gehörende Symmetrie spontan gebrochen ist. Nach dem Goldstone-Theorem folgt aus jeder gebrochenen kontinuierlichen Symmetrie ein masseloses Goldstone-Boson, woraus sich im Falle des chiralen Phasenübergangs die drei Pionen der starken Wechselwirkung ergeben.

1.1 Teilchen des Modells

1.1.1 Goldstone Anregungen

Eine Symmetrie ist immer dann spontan gebrochen, wenn der Grundzustand des Systems ein geringere Symmetrie aufweist als die Lagrangefunktion. Beispiele hierfür sind in Tabelle 1.1 aufgeführt. Unter der Annahme masseloser Quarks, kann mit

System	**gebrochene Symmetrie**	**Goldstone Anregung**
Kristall	Translation	Phonon
Ferromagnet	Rotation	Spinwelle
Suprafüssigkeit	globale Eichung	Phonon
Supraleiter	lokale Eichung	(Higgsmode)
elektroschwache WW	lokale Eichung	(Higgsmode)
QCD	chirale	π-Meson

Tabelle 1.1: Spontane Symmetrie Brechung [12]

geringem Energieaufwand ein zusätzliches Quark Antiquark Paar gebildet werden. Daher wird als Grundzustand der *QCD* ein Kondensat aus Quark Antiquarkpaaren angenommen [2]. Wird ein Fermionenpaar aus dem Vakuum erzeugt, so müssen aufgrund der geltenden Erhaltungssätze Impuls, Spin und Isopin von Teilchen und Antiteilchen sich gegenseitig aufheben. Daraus folgt für das erzeugte Fermionenpaar eine chirale Ladung, da immer Teilchen gleicher Helizität entstehen, wie in Abbildung 1.2 dargestellt. Der Ordnungsparameter des Phasenübergangs wird daher durch den Vakuumerwartungswert des skalaren Operators,

$$\langle 0| \bar{q}_L q_R + \bar{q}_R q_L |0\rangle \,, \tag{1.9}$$

beschrieben, der als chirales Kondensat bezeichnet wird. Dieser Erwartungwert ist zwar invariant unter Transformationen mit $U_R = U_L$, jedoch nicht unter $U_R \neq U_L$. Dies deutet darauf hin, dass die chirale Symmetrie spontan gebrochen ist. In diesem

Fall gilt Goldstones' Theorem, wobei die Ströme (1.7) die drei Goldstonebosonen erzeugen und vernichten. Es gilt [2],

$$\left\langle 0 \left| j^{\mu 5a}(x) \right| \pi_b \right\rangle = -ip^\mu \delta_b^a f_\pi e^{-ixp}, \tag{1.10}$$

mit p^μ als Impuls des Bosons und f_π der Pionen Zerfallskonstante. Die Ableitung des Erwartungswertes ergibt,

$$\partial_\mu \left\langle 0 \left| j^{\mu 5a}(x) \right| \pi_b \right\rangle = -p^2 \delta_b^a f_\pi e^{-ixp}. \tag{1.11}$$

Zu Beginn des Kapitels wurde bereits erwähnt, dass $j^{\mu 5a}$ ein erhaltener Strom der *QCD* ist, daher verschwindet die Ableitung. Da der Strom selbst nicht verschwindet, muss hier $p^2 = 0$ gelten, was für ein Teilchen auf der Massenschale bedeutet, dass $p^2 = E^2 - |\vec{p}^2| = m^2 = 0$. Für jeden der drei Ströme $j^{\mu 5a}$ ergibt sich ein masseloses Boson. Die Goldstonebosonen des chiralen Phasenübergangs werden mit den drei

Abbildung 1.2: Quark-Antiquarkpaar mit Gesamtimpuls und Drehimpuls Null.

relativ leichten Pionen identifiziert, die jedoch nicht, wie von Goldstone verlangt, masselos sind, da die Massen der leichten Quarks tatsächlich nicht identisch Null sind.

1.1.2 Massive Pionen

Werden die Quarkmassen in (1.1) nicht vernachlässigt, so ist die chirale Symmetrie explizit gebrochen, wodurch auch Goldstones Theorem nur noch näherungsweise gilt. Eine Konsequenz aus der Berücksichtigung der Quarkmassen ist eine endliche Pionenmasse. Mit Hilfe der Diracgleichungen für massive Quarks,

$$i\not{D} q = mq, \tag{1.12}$$
$$-iD_\mu \bar{q}\gamma^\mu = m\bar{q}, \tag{1.13}$$

lässt sich der Zusammenhang von Quark- und Pionenmasse herleiten. Die Masselosigkeit der Pionen folgte in Gleichung (1.11) aus der Erhaltung des axialen Isotriplettstroms. Explizit an (1.7) durchgeführt ergibt sich die Ableitung zu,

$$\partial_\mu j^{\mu 5a} = \partial_\mu \bar{q}\gamma^\mu\gamma^5\tau^a q + \bar{q}\gamma^\mu\gamma^5\tau^a \partial_\mu q. \tag{1.14}$$

Unter Verwendung des Antikommutators $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0$, lässt sich diese Gleichung schreiben als,

$$\partial_\mu j^{\mu 5a} = \partial_\mu \bar{q}\gamma^\mu\gamma^5\tau^a q - \bar{q}\gamma^5\tau^a\gamma^\mu\partial_\mu q - ig\bar{q}\tau^a\gamma^\mu\lambda_b G^b_\mu\gamma^5 q + ig\bar{q}\gamma^5\tau^a\gamma^\mu\lambda_b G^b_\mu q. \quad (1.15)$$

Die letzten beiden Terme heben sich gegenseitig auf, wobei die G_μ für die Gluonenfelder der QCD stehen , die mit γ^5 vertauschbar sind. Die λ_b sind die 8 Generatoren der $SU(3)$. Auf diese Weise ergeben sich die partiellen zu den kovarianten Ableitungen,

$$\partial_\mu j^{\mu 5a} = D_\mu \bar{q}\gamma^\mu\gamma^5\tau^a q - \bar{q}\gamma^5\tau^a \not{D} q. \quad (1.16)$$

Nach Einsetzen der Bewegungsgleichungen (1.12) und (1.13) ergibt sich die Ableitung des axialen Vektorstroms zu

$$\partial_\mu j^{\mu 5a} = 2im\bar{q}\gamma^5\tau^a q. \quad (1.17)$$

Da dieser proportional zum Quadrat der Pionenmasse ist, gilt $m_\pi^2 \sim m_q$. Wird zusätzlich zwischen m_u und m_d unterschieden, so lässt sich die Beziehung zwischen Pionenmasse und den Quarkmassen exakt bestimmen. Es gilt,

$$m_\pi^2 = (m_u + m_d)\,\frac{M^2}{f_\pi} \quad (1.18)$$

mit dem Massenparameter M von der Größe $400MeV$ und der Pionenzerfallskonstanten $f_\pi = 93MeV$ [2]. Die Pionenmasse ergibt sich damit für $(m_u + m_d) \simeq 10MeV$ zu etwa $140MeV$, was der gemessenen Pionenmasse entspricht. Neben den Pionen tritt im chiralen Phasenübergang noch ein massives skalares Meson, das σ-Meson auf, das in Kapitel 1.1.3 näher beschrieben wird. Die Spektralfunktionen ergeben sich in der symmetrischen Phase zu einem scharfen Peak. In der gebrochenen Phase tritt für $m_\sigma > 2m_\pi$ durch den Zerfallsprozess $\sigma \to 2\pi$ eine Verbreiterung des Pionspektrums auf.

1.1.3 Das Sigma-Meson

Neben den Goldstonebosonen taucht in der QCD noch ein weiteres Teilchen auf, das so genannte σ-Meson, welches eine zentrale Rolle in der Theorie des chiralen Phasenübergangs spielt. Dieses Teilchen repräsentiert die Amplitudenfluktuationen des chiralen Kondensates $\langle\bar{q}q\rangle$, während die Phasenfluktuationen durch die Pionen repräsentiert werden [6]. Das chirale Kondensat ist proportional zum σ-Meson, daher hat das Meson dieselben Eigenschaften wie in Kapitel 1.1.1 für das Kondensat beschrieben. Es handelt sich also um ein skalares-iososkalares Teilchen ($I = J = 0$). Im Allgemeinen ist es schwierig den Phasenübergang in der QCD zu beschreiben, da diese eine Theorie von Quarkfeldern ist, und die auftretenden Effekte durch Wechselwirkungen von farblosen Hadronen hervor gerufen werden. Für Berechnungen in der

QCD sind in der Regel aufwendige numerische Rechnungen notwendig, daher wird häufig die Wirkung mit Hilfe einer effektiven Lagrangefunktion $\mathcal{L}_{eff}$ beschrieben. Das σ-Meson wird dann durch die Fluktuationen um das Minimum des Potentials $V(\sigma)$ beschrieben. Damit stellt die Art des Auftretens eines massiven Mesons

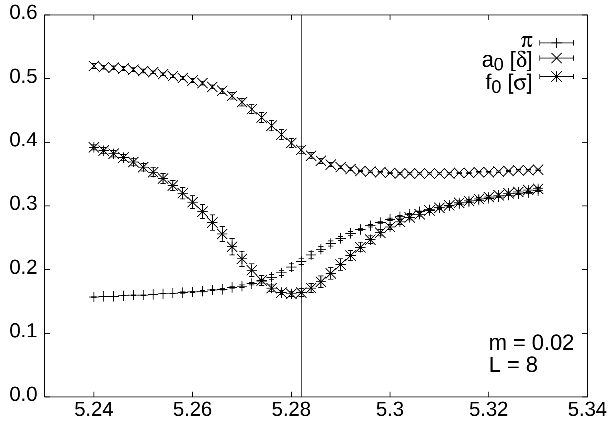

Abbildung 1.3: Massen in Abhängigkeit von der Temperatur [4].

in der Theorie, eine Analogie zum Higgsmechanismus im Standardmodell dar. Die Phasenfluktuationen können durch entsprechende Eichung von den longitudinalen Komponenten der Eichbosonen W^+, W^- und Z^0 absorbiert werden[13]. Die Existenz des σ-Mesons könnte einige Phänomene der Wechselwirkung der Hadronen erklären. Ein direkter experimenteller Nachweis konnte jedoch noch nicht erbracht werden. Untersuchungen der $\pi - \pi$-Streumatrix am *CHAOS* ergaben für größere Kerne einen erhöhten Anteil von Pionenpaaren mit den Quantenzahlen des σ-Mesons [6, 8]. Ein direkter Nachweis ist offensichtlich ähnlich kompliziert wie für das Higgsboson oder für Gluebälle. Lässt sich das σ-Meson nicht nachweisen, so müssen vermutlich dynamische Gründe gefunden werden, die das Meson am Erscheinen hindern. In der gebrochenen Phase kann das σ-Meson bestenfalls als eine breite Resonanz angesehen werden [1]. Die Spektralfunktion weist eine starke Konzentration des Spektrums für die Energien von zwei Pionenmassen auf.

1.2 *QCD* und $O(4)$-Symmetrie

Die Lagrangefunktion der QCD beinhaltet eine $SU(2)_L \times SU(2)_R \times U(1)_{L+R}$ Symmetrie, wobei die vektorielle $U(1)$ Transformation die Baryonzahl beschreibt. Die chirale Symmetrie wird unabhängig für rechts- und linkshändige Quarks durch spezielle unitäre Matrizen beschrieben. Für zwei masselose Quarkflavours ergibt sich daraus ein Phasenübergang zweiter Ordnung, während für drei oder mehr Flavours der Phasenübergang erster Ordnung ist [5]. Unterhalb einer kritischen Temperatur T_c ist diese Symmetrie spontan zu einer $SU(2)_{R+L} \times U(1)_{R+L}$-Symmetrie gebrochen. Das chirale Kondensat (1.9) lässt sich auch in der Form

$$M_{ij} = \langle \bar{q}_{Li} q_{Rj} \rangle \tag{1.19}$$

schreiben. Die Transformationen ergeben sich dann zu

$$M \rightarrow U^{\dagger} M V. \tag{1.20}$$

Wobei U und V unitäre Matrizen sind. Um den Phasenübergang beschreiben zu können, benötigen wir ein Modell, das der selben Universalitätsklasse angehört. Die Transformationen (1.20) erzeugen eine $U(2) \times U(2)$ Symmetrie. Dieses Problem kann jedoch gelöst werden, indem man M auf unitäre Matrizen beschränkt [5]. Die Matrix M lässt sich nun durch vier reelle Parameter beschreiben

$$M = \sigma + \imath \vec{\pi} \cdot \vec{\tau}. \tag{1.21}$$

mit τ^a als den Generatoren der $SU(2)$. Der Ordnungsparameter kann so mit Hilfe eines vier komponentigen Vektors beschrieben werden $\phi = (\sigma, \vec{\pi})$, und die Transformationen entsprechen dann den $O(4)$ Rotationen in diesem inneren Raum. Wir beschreiben den chiralen Phasenübergang also mit einer vier komponentigen skalaren Feldtheorie.

1.3 Das lineare Sigma-Modell

Ein häufig verwendetes Modell, um das Verhalten der Pionen bei niedrigen Energien zu beschreiben ist das *lineare Sigma-Modell*. Um zu einer Theorie bei endlichen Temperaturen überzugehen, wird die dimensionale Reduktion angewendet [23]. Für endliche Temperaturen T, ist die euklidische Zeitkomponente dann beschränkt durch periodische Randbedingungen mit Abstand $\beta = 1/T$. Dies führt zu diskreten Energien $\omega_n = 2\pi n/\beta$. Die Integration der fouriertransformierten Lagrangedichte über die ω_n mit $n \neq 0$ führt dann zu einer effektiven Theorie in drei Dimensionen [23]. In Kapitel 1.2 wurde gezeigt, dass die volle Symmetrie des chiralen Phasenübergangs durch ein $O\left(4\right)$ symmetrisches Modell vierkomponentiger skalarer Felder $\Phi^i\left(x\right)$ mit $i = 1, \ldots, 4$ beschrieben werden kann. Die effektive Lagrangedichte lässt sich dann schreiben als,

$$\mathcal{L}_{eff} = \frac{\beta}{2} \left(\partial_\mu \Phi\right)^2 + V\left(\Phi^2\right). \tag{1.22}$$

Die Lagrangefunktion ist somit invariant unter Rotationen der Felder Φ^i im $O\left(4\right)$-Raum,

$$\Phi^i \longrightarrow R^{ij} \Phi_j \tag{1.23}$$

und erfüllt die in Kapitel 1.2 gestellten Anforderungen an das Modell. Hat das Potential $V(\Phi^2)$ die Form $\lambda\left(\Phi^2-1\right)^2$, so spricht man für $\lambda \to \infty$ vom *nichtlinearen Sigmamodell*, da der Betrag der Felder nicht variabel sondern auf $\Phi^2 = 1$ beschränkt ist [11]. Es ist üblich einen Term in die Lagrangefunktion einzuführen, der diese Symmetrie explizit bricht. Es ist sinnvoll an dieser Stelle zwischen den Pionenfeldern und dem σ-Mesonenfeld zu unterscheiden. Die Felder Φ werden dann als $\Phi = (\sigma, \vec{\pi})$ betrachtet. Durch die Einführung eines äußeren Feldes $\vec{h}$ erhält die Lagrangefunktion einen zusätzlichen Term $-\vec{h}\cdot\Phi$ mit,

$$\vec{h} = \begin{pmatrix} h \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad -\vec{h}\Phi = -h\sigma.$$

Dadurch bleibt die Lagrangefunktion (1.22) nur noch unter Rotationen im dreidimensionalen Raum der Pionenfelder invariant, jedoch nicht mehr unter (1.23). Ein explizit symmetriebrechender Term verleiht, wie in Kapitel 1.1.2 beschrieben, den Pionen eine Masse. Das äußere Feld kann daher analog als Quarkmasse angesehen werden. Für die Pionenmasse gilt deshalb $m_\pi \sim \sqrt{h}$.

Die aus der Quantenmechanik bekannte Pfadintegral-Methode lässt sich auch auf Quantenfeldtheorien anwenden, wobei die Ortsraumkoordinaten zu einem bestimmten Zeitpunkt q_i in die Amplituden der Felder $\Phi(\vec{x})$ übergehen [2]. Observablen lassen sich dann äquivalent zur Statistischen Mechanik mit Hilfe der Zustandssumme berechnen. Die Zustandssumme des Modells ergibt sich mit äußerem Feld $\vec{h}$ zu,

$$Z = \int \prod_i d\Phi(\vec{x}_i) \exp\left[\int d^3x \left(\mathcal{L}_{eff} - \vec{h}\Phi(\vec{x})\right)\right] \tag{1.24}$$

Die wichtigsten Observablen in dieser Arbeit sind die Korrelationsfunktionen und die Erwartungswerte der Felder. Auf die gemessenen Observablen wird in Kapitel (3.3) noch genauer eingegangen. Allgemein lassen sich mit Hilfe der Zustandssumme die Erwartungswerte einer Observablen $\mathcal{O}(\Phi)$ bestimmen über,

$$\langle\mathcal{O}(\Phi)\rangle = \frac{1}{Z}\int \prod_i d\Phi(\vec{x}_i)\mathcal{O}(\Phi) \exp\left[\int d^3x \left(\mathcal{L}_{eff} - \vec{h}\Phi(\vec{x})\right)\right]. \tag{1.25}$$

Die einfachste denkbare Observable $\mathcal{O}(\Phi)$ in diesem Modell ist der Erwartungswert des Feldes $\Phi(\vec{x})$. Die Fouriertransformierte $\tilde{\Phi}(\vec{p})$ lautet dann,

$$\tilde{\Phi}(\vec{p}) = \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{x}\vec{p}}\Phi(\vec{x}) \tag{1.26}$$

In den Verwendeten Korrelationsfunktionen wird der transversale Impuls auf $p^\perp = \vec{0}$ projiziert, sodass z.B. für Korrelationen in z-Richtung über die x- und y-Komponente integriert wird. Auf Impuls $p^{\perp} = 0$ projiziert vereinfacht sich Formel (1.26) zu,

$$\Phi(z) = \int \frac{dxdy}{(2\pi)^2} \Phi(\vec{x}) \tag{1.27}$$

Für die Korrelationen zwischen unterschiedlichen Abständen z, z' kann dann $\mathcal{O} = \Phi(z)\Phi(z')$ gesetzt werden. Mit $\tau = z' - z$, und der Projektion auf Impuls $p^{\perp} = 0$ ergibt sich die Korrelationsfunktion zu,

$$G(\tau) = \langle \Phi(0)\Phi(\tau) \rangle \,. \tag{1.28}$$

Die Korrelationsfunktionen der σ-Mesonen werden durch die Korrelationen zwischen den 1-Komponenten des Vektors Φ beschrieben, die zwischen den Pionen durch die übrigen Komponenten. Im Folgenden werdendie Korrelationsfunktionen der σ-Mesonen auch mit $G^{\|}(\tau)$ und die der Pionen mit $G^{\perp}$.

Kapitel 2

Spektralfunktionen von MC-Daten

2.1 Die Maximum Entropie-Methode

Die Spektralfunktionen von Teilchen sind für die Elementarteilchenphysik von großem Interesse. Viele Observablen, die aus ihr abgeleitet werden können, lassen sich im Experiment sehr gut messen. Leider ist es nicht einfach Spektralfunktionen zu berechnen, auch lassen sie sich nicht unmittelbar aus Gittersimulationen entnehmen. Da es nicht möglich ist, Spektralfunktionen direkt aus Monte Carlo Simulationen zu extrahieren, muss zunächst eine auf dem Gitter messbare Observable bestimmt werden, aus der sich die Spektralfunktion berechnen lässt. Zwischen Korrelationsfunktion und Spektralfunktion besteht folgender Zusammenhang [15],

$$G(\tau) = \int d\omega A(\omega) \frac{e^{-\tau\omega}}{1 \pm e^{-\beta\omega}} \,, \tag{2.1}$$

mit dem negativen Vorzeichen für Bosonen und positivem für Fermionen. Dabei steht β hier für die Hälfte der Ausdehnung des Gitters $L/2$. Der zweite Faktor in (2.1) wird auch als Kernel der Integration bezeichnet. Auf dem Gitter wird aus der Integration die Summe über die Produkte $A_i K_{ij}$. Dabei steht A_i für die Spektralfunktion am diskretisierten Punkt ω_i und K_{ij} für den Kernel der Integration,

$$K_{ij} = \frac{\cosh\left(\omega_i(\tau_j - L/2)\right)}{\sinh(L/2)}. \tag{2.2}$$

Die Korrelationsfunktionen (1.28) sind eine in Monte Carlo Simulationen häufig gemessene Größe. Eine Möglichkeit, aus einem Datensatz aus Korrelationsfunktionen die Spektralfunktion zu gewinnen, ist die Anwendung der *Maximum Entropie*

Methode. Das Hauptproblem bei der Bestimmung von $A(\omega)$ ist, dass die Korrelationsfunktion auf dem Gitter nur aus wenigen Punkten besteht und somit eine Vielzahl vom Spektralfunktionen die Korrelationsfunktion mehr oder weniger gut reproduzieren können. In der *Maximum Entropie Methode* wird mit Hilfe von Bayes Theorem die Wahrscheinlichkeit für all diese Spektralfunktionen berechnet. Die resultierende Spektralfunktion ergibt sich dann aus den vorgeschlagenen Funktionen und deren Wahrscheinlichkeit. Bayes Theorem besagt,

$$Pr\,[a,b] = Pr\,[a|b]\,Pr\,[b] = Pr\,[b|a]\,Pr\,[a]\,, \tag{2.3}$$

mit zwei Ereignissen a und b, wobei $Pr\,[a|b]$ die bedingte Wahrscheinlichkeit für a bei gegebenem b ist. In der Maximum Entropie Analyse wird nun nach der Wahrscheinlichkeit für eine Spektralfunktion $A(\omega)$ bei einem gemessenen Datensatz von Korrelationsfunktionen $\bar{G}$ gesucht, $Pr\left[A|\bar{G}\right]$. Diese Wahrscheinlichkeit ist jedoch nicht unmittelbar bekannt. Sie lässt sich jedoch mit Hilfe von Bayes Theorem umschreiben zu,

$$Pr\left[A|\bar{G}\right] = Pr\left[\bar{G}|A\right] Pr\,[A]\,/Pr\left[\bar{G}\right]. \tag{2.4}$$

Der erste Term auf der rechten Seite gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass die Spektralfunktion A nach Formel (2.1) wieder die Korrelationsfunktion ergibt. Diese Wahrscheinlichkeit lässt sich durch die Likelihood-Funktion L, die in Kapitel 2.1.1 beschrieben wird, bestimmen. Es gilt $Pr\left[\bar{G}|A\right] \sim e^{-L}$. Für den zweiten Term ist ein gewisses Vorwissen um die Beschaffenheit der Spektralfunktion, ein *default Modell*, notwendig. $Pr\,[A]$ gibt dann an, wie gut die Spektralfunktion dieses *default Modell* erfüllt. Hier geht die Entropie S ein, die in Kapitel 2.1.2 beschrieben wird. Der letzte Term ist die Wahrscheinlichkeit für den gemessenen Datensatz und kann daher als Konstante betrachtet werden [14]. Im Folgenden wird der Term $P\left[\bar{G}\right]$ deshalb weggelassen. Da es sich bei dem verwendeten *default Modell* nur um eine Näherung an die Spektralfunktion handelt, ist nicht von vornherein klar, wie stark die Entropie im Gegensatz zur Likelihood-Funktion gewichtet werden muss. Daher wird in die Wahrscheinlichkeiten ein weiterer Faktor α mit einbezogen, der für eine Gewichtung zwischen Likelihood-Funktion und Entropie sorgt. Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit der Spektralfunktion $Pr\,[A,\alpha] \sim e^{\alpha S}$. Gleichung (2.4) ergibt mit dem Gewichtsfaktor α,

$$Pr\left[A,\alpha|\bar{G}\right] = Pr\left[\bar{G}|A,\alpha\right] Pr\,[A,\alpha]\,. \tag{2.5}$$

Wendet man auf (2.5) nochmals Bayes Theorem an, so ergibt sich,

$$Pr\left[A,\alpha|\bar{G}\right] = Pr\left[\bar{G}|A,\alpha\right] Pr\,[A,\alpha] \tag{2.6}$$

$$= Pr\left[\bar{G}|A,\alpha\right] Pr\,[A|\alpha]\,Pr\,[\alpha]\,. \tag{2.7}$$

Die Wahrscheinlichkeit des Gewichtsfaktors $Pr\,[\alpha]$ kann als Konstante gewählt werden oder nach Jeffrey proportional zu $\frac{1}{\alpha}$ [15]. Die anderen Wahrscheinlichkeiten in Gleichung (2.6) lassen sich zu e^Q mit $Q = \alpha S - L$ zusammenfassen, wobei noch die richtigen Normierungskonstanten für die Wahrscheinlichkeiten fehlen. Diese sorgen dafür, dass sich das Integral über die Variable zu eins ergibt. Für Wahrscheinlichkeiten von zwei Variablen gilt,

$$\int dbPr\left[a,b\right] = Pr\left[a\right]. \tag{2.8}$$

Die gesuchte Wahrscheinlichkeit $Pr\left[A|\bar{G}\right]$ lässt sich demnach als

$$Pr\left[A|\bar{G}\right] = \int d\alpha Pr\left[\alpha\right] \frac{e^Q}{Z_L Z_S(\alpha)} \tag{2.9}$$

schreiben. Wobei Z_L und $Z_S$für die Normierungskonstanten der Likelihood-Funktion und der Entropie stehen, die in Kapitel 2.1.1 bzw. 2.1.2 bestimmt werden. Die rechte Seite entspricht hier Gleichung (2.6), was sich mit Bayes Theorem (2.3) auch zu einem Integral mit einer von α abhängigen Verteilungsfunktion $Pr\left[\alpha|\bar{G}\right]$ umschreiben lässt,

$$Pr\left[A|\bar{G}\right] = \int d\alpha Pr\left[A|\bar{G},\alpha\right] Pr\left[\alpha|\bar{G}\right] \tag{2.10}$$

mit

$$Pr\left[\alpha|\bar{G}\right] = Pr\left[\alpha\right] \int \mathcal{D}A \frac{e^Q}{Z_L Z_S}. \tag{2.11}$$

Für ein gegebenes α ist also die Spektralfunktion $A(\omega)$, die die Wahrscheinlichkeit $Pr\left[A|\bar{G}\right]$ maximiert, gegeben durch die Variation von $A(\omega)$ über Q,

$$\frac{\delta Q}{\delta A}_{|A=\hat{A}} = 0. \tag{2.12}$$

Die Lösung $\hat{A}$ hängt hier allerdings noch von α ab. Diese Methode wird auch als historische Maximum Entropie bezeichnet. Nach einer von Bryan entwickelten Methode ist die Lösung für die gesuchte Spektralfunktion $\bar{A}(\omega)$ gegeben durch

$$\bar{A}(\omega) = \int d\alpha \hat{A}_\alpha(\omega) Pr\left[\alpha|\bar{G}\right]. \tag{2.13}$$

Wobei $\hat{A}_\alpha$ die Funktionen sind, die nach Gleichung (2.12) die Wahrscheinlichkeit $Pr\left[A|\bar{G}\right]$ für ein gegebenes α maximieren. Die Wahrscheinlichkeit $Pr\left[\alpha|\bar{G}\right]$ sollte einen scharfen Peak in der Verteilung über α enthalten und ansonsten stark abfallen, sodass für die Integration über α die meisten Werte vernachlässigt werden können. Die numerische Integration wird in der Regel über $dlog\alpha$ durchgeführt, was zu einem Faktor $d\alpha/d\log\alpha = \alpha$ im Integral führt. Dieser Faktor verschwindet jedoch, wenn $Pr\left[\alpha\right]$ in (2.11) als $\frac{1}{\alpha}$ gewählt wird. Die Lösung $\bar{A}$ maximiert allerdings nicht unbedingt die Wahrscheinlichkeit $Pr\left[A|\bar{G}\right]$, da die Spektralfunktionen, über die integriert wird, so gewählt werden, dass sie die Wahrscheinlichkeit nur lokal für ein α maximieren. Diese Methode wird auch als klassische Maximum Entropie bezeichnet. Um die endgültige Spektralfunktion zu ermitteln, erhält $Pr\left[\alpha|\bar{G}\right]$ noch einen Faktor $\exp(\frac{1}{2}\sum_i \log(\frac{\alpha}{\alpha+\lambda_i}))$, der in den Kapiteln 2.1.1 und 2.1.2 noch genauer erläutert wird.

2.1.1 Likelihood-Funktion

Die Likelihood-Funktion soll die Wahrscheinlichkeit $Pr\left[\bar{G}|A\right]$ beschreiben, mit der eine gegebene Spektralfunktion $A(\omega)$ die Korrelationsfunktion über (2.1) erzeugt. Eine gängige Möglichkeit, dies zu erreichen, ist die Anwendung, der Methode der kleinsten Fehlerquadrate, χ^2. In Gittersimulationen wird nur eine endliche Anzahl von Abständen der Korrelationsfunktion G_i,$i = 1, \ldots, L$ gemessen. Wird die Spektralfunktion numerisch bestimmt, so ist $A(\omega)$ durch die Anzahl der Stützstellen N, der Diskretisierung von ω gegeben durch $A_i = A(\omega_i)$ mit $i = 0, \ldots, N$. Die Korrelationsfunktion ist dann gegeben durch

$$G_i = \sum_{j=0}^{N} K_{ij} A_j, \tag{2.14}$$

wobei K_{ij} für den Kernel $K(\tau_i, \omega_j)$ der Integration (2.2) steht. Für χ^2 gilt nun,

$$\chi^2 = \sum_{i,j}^{L} \left(\bar{G}_i - G_i\right) \left[C^{-1}\right]_{ij} \left(\bar{G}_j - G_j\right), \tag{2.15}$$

mit der Kovarianzmatrix C und $\bar{G}_i$ als Mittelwerte aus den Messungen der Korrelationsfunktion im Abstand τ_i. Die Kovarianzmatrix ist gegeben durch [15],

$$C_{ij} = \frac{1}{M\left(M-1\right)} \sum_{k=1}^{M} \left(\bar{G}_i - G_i^{(k)}\right) \left(\bar{G}_j - G_j^{(k)}\right) \tag{2.16}$$

mit der Anzahl der Messungen M und $G_i^{(k)}$ als der k-ten Messung im Abstand τ_i. Das Minimieren von χ^2 entspricht der Maximierung der Wahrscheinlichkeit $Pr\left[\bar{G}|A\right]$, damit ergibt sich,

$$Pr\left[\bar{G}|A\right] = \frac{1}{Z_L} e^{-L} = \frac{1}{Z_L} e^{-\frac{1}{2}\chi^2}. \tag{2.17}$$

Die Normierungskonstante Z_L ist dann gegeben durch das Integral der Wahrscheinlichkeit über alle möglichen Rekonstruktionen der Korrelationsfunktion G nach (2.14)

$$Z_L = \int \prod_i dG_i e^{-\frac{1}{2}\chi^2}. \tag{2.18}$$

Aus Gleichung (2.15) ergibt sich ein Produkt aus Gaußintegrationen mit der Lösung,

$$Z_L = (2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det C}. \tag{2.19}$$

Wobei N der Anzahl der Abstände τ_i entspricht. Wie in Kapitel 2.1 erwähnt, entspricht $\bar{A}(\omega)$ aus (2.13) nicht unbedingt der Spektralfunktion, die $Pr\left[A|\bar{G}\right]$ maximiert. Um das globale Maximum der Wahrscheinlichkeit zu erhalten, kann näherungsweise Q um das Maximum bei festem α variiert werden. Unter Einführung einer neuen Funktion X, für die gilt

$$\frac{\partial A_j}{\partial X_i} = \sqrt{A_j}\delta_{ij}, \tag{2.20}$$

folgt dann,

$$\begin{aligned} Q(A,\alpha) \approx & \quad Q(\hat{A}_\alpha) + \sum_i \delta X_i \frac{\partial Q}{\partial X_i}_{|A=\hat{A}_\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{ij} \delta X_i \delta X_j \left.\frac{\partial Q}{\partial X_i \partial X_j}\right|_{A=\hat{A}_\alpha} & (2.21) \\ \approx & \quad Q(\hat{A}_\alpha) + \sum_i \delta X_i \sqrt{A_i}\frac{\partial Q}{\partial A_i}_{|A=\hat{A}_\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{ij} \delta X_i \delta X_j \sqrt{A_i A_j} \left.\frac{\partial Q}{\partial A_i \partial A_j}\right|_{A=\hat{A}_\alpha} & (2.22) \end{aligned}$$

wobei die ersten Ableitungen von Q nach (2.12) verschwinden. Um wieder die Wahrscheinlichkeit $Pr\left[\alpha|\bar{G}\right]$ wie in (2.13) zu erhalten, muss das Feld $A(\omega)$ oder jetzt $X(\omega)$ noch ausintegriert werden. Für das Integrationsmaß $\mathcal{D}A$ wird in der Regel die Metrik $\frac{1}{\sqrt{A_i}}$ eingeführt [15] woraus sich ergibt

$$\mathcal{D}A = \prod_i \frac{dA_i}{\sqrt{A_i}} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{D}A \longrightarrow \mathcal{D}X = \prod_i dX_i. \tag{2.23}$$

Der zur Likelihoodfunktion gehörende Anteil von (2.21) lässt sich mit Hilfe von (2.20) und (2.15) berechnen,

$$\Lambda_{ij} = \sqrt{A_i}\frac{\partial^2 L}{\partial A_i \partial A_j}\sqrt{A_j} = \sum_{kl} \sqrt{A_i} K_{ik} \left[C^{-1}\right]_{kl} K_{lj}\sqrt{A_j}. \tag{2.24}$$

Wobei K_{ij} hier wieder für den Kernel der Integration steht. Das Ergebnis (2.24) stellt eine $N \times N$ Matrix dar und wird im Folgenden als Λ bezeichnet. Um die gesuchte Wahrscheinlichkeit $Pr\left[\alpha|\bar{G}\right]$ bestimmen zu können, muss der äquivalente Term für αS noch berechnet werden, wozu die Entropie zunächst definiert werden muss.

2.1.2 Die Entropie

Die Entropie S soll angeben, wie gut eine Spektralfunktion mit einem gegebenen *default* Modell $m(\omega)$ übereinstimmt. Für das Maximum der Entropie muss daher gelten $A(\omega) = m(\omega)$. Eine Definition, die diese Bedingung erfüllt, ist,

$$S = \sum_i A_i - m_i - A_i \ln\left(A_i/m_i\right). \tag{2.25}$$

Mit $A_i = A(\omega_i)\Delta\omega$ und $m_i = m(\omega_i)\Delta\omega$. Der zur Entropie gehörige Anteil der zweiten Ableitung aus (2.22) ergibt somit,

$$\sqrt{A_i A_j}\frac{\partial^2 \alpha S}{\partial A_i \partial A_j} = \delta_{ij} A_i \alpha \frac{1}{m_i} \cdot \frac{m_i}{A_i} = \alpha\delta_{ij} \tag{2.26}$$

Die Normierungskonstante Z_S, die für die Wahrscheinlichkeit $Pr[A,\alpha]$ in (2.5) benötigt wird, lässt sich aus dem Integral von $e^{\alpha S}$ über alle möglichen Spektralfunktionen A an jeder Position ω_i berechnen. Da die Entropie so definiert ist, dass sie ihr Maximum bei $A_i = m_i$ erreicht mit $S = 0$, kann die Spektralfunktion um m_i mit einer Funktion X entwickelt werden. Die erste Ableitung von S verschwindet wiederum nach (2.12), sodass ungefähr gilt,

$$Z_S = \int \prod_i^N \frac{dA_i}{\sqrt{A_i}} e^{\alpha S} \approx \int \prod_i^N dX_i e^{-\alpha X^2/2} = \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{N}{2}}. \tag{2.27}$$

Hierbei gilt $X^2 = \sum_i X_i^2$. Der Faktor $\alpha^{\frac{N}{2}}$ kann auch als $\sqrt{\det \alpha I}$ mit der N-dimensionalen Einheitsmatrix I geschrieben werden. Der zusätzliche Summand aus (2.21) lässt sich mit Hilfe der Ergebnisse für die Ableitungen von Q (2.26) und (2.24) in die Wahrscheinlichkeit $Pr\left[\alpha|\bar{G}\right]$ einfügen als,

$$Pr\left[\alpha|\bar{G}\right] \approx Pr[\alpha] \frac{e^{Q(\hat{A}_\alpha)}}{Z_L Z_S} \frac{(2\pi)^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\det(\alpha I + \Lambda)}}. \tag{2.28}$$

Die Determinante kann auch zusammen mit dem Faktor $\alpha^{N/2}$ aus Z_S in den Exponenten gezogen werden. $Q(A,\alpha)$ ergibt sich dann zu,

$$Q(A,\alpha) = Q(\hat{A}_\alpha) + \frac{1}{2}\sum_i \log\left(\frac{\alpha}{\alpha + \lambda_i}\right) \tag{2.29}$$

mit λ_i als den Eigenwerten der Matrix Λ. Die Determinante aus (2.28) ist dann gleich dem Produkt der Eigenwerte von Λ.

2.1.3 Das *default* Modell

Das *default* Modell dient dazu, bekanntes Wissen über die Korrelationsfunktion in die Berechnung der Spektralfunktion mit einzubringen. Für die transversalen Felder ist die Korrelation im wesentlichen durch den freien Propagator bestimmt. Als Massenterm kann hierbei die Wechselwirkung mit dem äußeren Feld $h \cdot \Phi^{\|}$ betrachtet werden [21]. Die Masse m ergibt sich dann aus,

$$m^2\Phi^2 = h\Phi^{\|} \longrightarrow m^2 = \frac{h}{\langle\Phi^{\|}\rangle}. \tag{2.30}$$

Die Korrelationsfunktion ergibt sich, mit der Projektion auf Impuls Null für die Impulskomponenten senkrecht zur Korrelationsrichtung, zu,

$$G^{\perp}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp^3}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{x}\vec{p}}}{\vec{p}^2 + m^2} \delta(p_y)\delta(p_z) \tag{2.31}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{(2\pi)^3} \frac{e^{ixp_x}}{p_1^2 + m^2} \tag{2.32}$$

$$= \frac{1}{8\pi^2} \frac{e^{-mx}}{m}. \tag{2.33}$$

Für kleine Abstände folgt mit (2.30),

$$G^{\perp}(x) = \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{\frac{\langle \Phi^{\|} \rangle}{h}} \tag{2.34}$$

Als Spektralfunktion wird nun $A(\omega) = m_0 \cdot \omega^{\alpha}$ mit der Konstante m_0 angenommen. Unter dieser Annahme ergibt sich aus dem Kontinuumslimes von (2.1) die Korrelationsfunktion zu,

$$G^{\perp}(r) = \int_0^{\infty} d\omega m_0 \cdot \omega^{\alpha} e^{-\omega r} \tag{2.35}$$

$$= \frac{m_0}{r^{\alpha+1}} \int_0^{\infty} d\Omega \Omega^{\alpha} e^{-\Omega} \tag{2.36}$$

mit $\Omega = \omega r$. Für (2.34) gilt daher $\alpha = -1$. Das Integral (2.36) divergiert über den angegebenen Integrationsbereich, deshalb muss als untere Integrationsgrenze ein Ω_{min} gewählt werden. Die Korrelationsfunktion ergibt sich daraus zu,

$$G^{\perp}(r) = -m_0 \cdot Ei(-\Omega_{min}) = \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{\frac{\langle \Phi^{\|} \rangle}{h}} \tag{2.37}$$

Die Funktion $Ei(-x)$ ist die Integralexponentialfunktion, die durch das Integral in (2.36) mit $\alpha = -1$ und der unteren Integrationsgrenze x definiert ist [24]. Das *default*-Modell $m(\omega)$ der transversalen Korrelationsfunktionen ist daher gegeben durch,

$$m(\omega) = -\frac{1}{8\pi^2 Ei(-\Omega_{min})} \sqrt{\frac{\langle \Phi^{\|} \rangle}{h}} \cdot \omega^{-1} = m_0^{\perp} \omega^{-1}. \tag{2.38}$$

Als untere Grenze der Integralfunktion $Ei(-x)$ wird $\Omega_{min} = 0.001$, als kleinster Wert von ω in der Diskretieierung, gewählt, woraus folgt $Ei(-\Omega_{min}) \simeq -6.33154$. Da der Erwartungswert $\langle \Phi^{\|} \rangle$ sich für verschiedene Temperaturen unterscheidet, ist auch die Konstante des *default* Modells m_0 unterschiedlich. Die Werte sind im Anhang A.1 aufgeführt. Die Fourier-Transformierte der longitudinalen Korrelationsfunktion ist [21],

$$G^{\|}(\vec{p}) = \frac{1}{4\pi\mu_2} \frac{1}{\vec{p}} \arctan(\vec{p}/2m). \tag{2.39}$$

μ_2 steht für den 2nd Moment Erwartungswert, der durch die Summe $\sum_x^L x^2 G(x)$ gegeben ist [20]. Analoges Vorgehen zur transversalen Korrelationsfunktion führt zu,

$$G^{\|}(r) = -\frac{1}{64\pi^3\mu_2} Ei(-2mr) \approx \frac{1}{128\pi^3\mu_2} \frac{e^{-2mr}}{mr}. \tag{2.40}$$

Wie aus (2.36) ersichtlich ergibt sich aus (2.40) ein konstantes *default*-Modell mit der Konstanten,

$$m_0^{\|} = \frac{1}{128\pi^3\mu_2} \sqrt{\frac{\langle \Phi^{\|} \rangle}{h}}. \tag{2.41}$$

Die unterschiedlichen Werte von $m_0^{\|}$ sind ebenfalls im Anhang A.1 aufgeführt.

Kapitel 3

Numerische Methoden.

3.1 *QCD* auf dem Gitter

In Quantenfeldtheorien treten Divergenzen auf, die sich jedoch durch geeignete Regularisierungsmethoden beherrschen lassen. Eine dieser Methoden ist die so genannte Gitterregularisierung, dazu werden die Quantenfelder nicht in der kontinuierlichen Raumzeit sondern auf einem diskreten Gitter formuliert. Der Abstand zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten beträgt die endliche Länge a. Da jedes Gitter nur eine endliche Anzahl N, an Punkten enthält, ist der Impulsraum, der durch die Fouriertransformation gegeben ist, ebenfalls diskret und endlich. Daher beinhaltet die Gitterregularisierung automatisch einen ultravioletten cut-off. Die Observablen werden auf dem Gitter mit Hilfe der Zustandssumme berechnet. Das Verwendete Modell wird durch eine Wirkung in drei räumlichen Dimensionen beschrieben. Um die Theorie auf dem Gitter zu formulieren müssen die folgenden Ersetzungen durchgeführt werden,

$$x_i \longrightarrow n_i a \tag{3.1}$$

$$p_i \longrightarrow \frac{2\pi}{L} k_i \;\; ; \;\; k_i = 0, \pm 1, \ldots \pm L \tag{3.2}$$

$$\Phi(x) \longrightarrow \Phi(na) \tag{3.3}$$

$$\int d^3x \longrightarrow a^3 \sum_n \tag{3.4}$$

$$\mathcal{D}\Phi \longrightarrow \prod_n d\Phi(na) \tag{3.5}$$

$$\triangle\Phi(x) \longrightarrow \frac{1}{a^2} \hat{\triangle}\Phi(na) \tag{3.6}$$

L steht hierbei für die Anzahl der Gitterpunkte in i-Richtung. Als Exponent der Zustandssumme muss die Wirkung dimensionslos sein, was im Kontinuum durch die Multiplikation mit dem Faktor $1/\hbar$ erreicht wird, wobei häufig die natürlichen Einheiten mit $\hbar = 1$ verwendet werden. Die einzige Einheit auf dem Gitter ist der Gitterabstand a. Durch eine Reskalierung der Felder und der Parameter im Potential $\Phi_n = a\Phi(na)$ kann der Gitterabstand vollständig aus der Wirkung entfernt werden. Der Laplaceoperator $\hat{\triangle}$ ist dann definiert durch,

$$\hat{\triangle}\Phi_n = \sum_{\mu} \left(\Phi_{n+\hat{\mu}} + \Phi_{n-\hat{\mu}} - 2\Phi_n\right). \tag{3.7}$$

Die Summe läuft hier über alle Raumrichtungen, wobei $\hat{\mu}$ für den Einheitsvektor in Richtung μ steht. In dem hier verwendeten effektiven Modell gilt $\mu = 1, 2, 3$. Der dynamische Anteil der Lagrangedichte (1.22) ergibt sich in der Wirkung zu,

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} d^3x \partial_\mu \Phi \partial_\mu \Phi = \Phi \partial_\mu \Phi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int\limits_{-\infty}^{\infty} d^3x \Phi \triangle \Phi. \tag{3.8}$$

Der erste Term auf der rechten Seite verschwindet, da die Felder selbst im unendlichen verschwinden. Desweiteren gelten auf dem Gitter periodische Randbedingungen, sodass für jede Raumrichtung gilt $\Phi_{L+1} = \Phi_1$ bzw. $\Phi_{1-1} = \Phi_L$. Die euklidische Wirkung, die hier verwendet wird, hat die Form wie in [9],

$$S_E(\Phi) = -\beta \sum_{n,\mu} \left(\Phi_n^a \Phi_{n+\mu}^a + \Phi_n^a \Phi_{n-\mu}^a\right) + \lambda \sum_n \left(\Phi_n^a \Phi_n^a - 1\right)^2 + \sum_n \Phi_n^a \Phi_n^a - h \sum_n \Phi_n^1. \tag{3.9}$$

Die Summation über n läuft hierbei über alle Gitterpunkte des dreidimensionalen Gitters, woraus sich bei gleicher Gitterlänge L in alle Raumrichtungen die Anzahl L^3 ergibt. Φ^a steht für die a-te Komponente des vierkomponentigen Feldes und μ für die Translation in eine der drei Raumrichtungen. Über a muss hier jeweils von $a = 1, \ldots, 4$ summiert werden. Der Parameter β beschreibt die Kopplung des Feldes am Punkt n an seine nächste Nachbarn. Ist β klein, so kann sich das Feld am Punkt n in jede beliebige Richtung ausrichten, ohne die Wirkung wesentlich zu verändern. Für große β wird die Wirkung minimal, falls Φ_n die Ausrichtung seiner nächsten Nachbarn annimmt. Dieser Parameter bestimmt den Phasenübergang und wird daher, wie Kapitel 1.3 bereits erwähnt, als inverse Temperatur angesehen. Der letzte Summand in der Wirkung entspricht einem explizit symmetriebrechendem Term, wie in den Kapiteln 1.3 und 1.1.2 beschrieben. Deshalb entspricht der Parameter h der Quarkmasse. Mit Hilfe der Wirkung (3.9) könnten nun die Zustandssumme (1.24) und auf dem Gitter definierte Observablen nach (1.25) berechnet werden, wenn die Anzahl der möglichen Gitterkonfigurationen endlich wäre. Mit der euklidischen Wirkung in (1.25) gilt,

$$\frac{1}{Z} \exp\left(-S_E(\Phi)\right) > 0 \quad \text{und} \quad \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\Phi e^{-S_E(\Phi(x))} = 1 \tag{3.10}$$

Der Faktor $\exp\left(-S_E\right)/Z$ kann daher als Wahrscheinlichkeit für die Feldkonfiguration von Φ betrachtet werden. Das Integral über $\mathcal{D}\Phi$ ergibt auf dem Gitter eine unendliche Summe. Daher muss eine Auswahl an Konfigurationen getroffen werden, die repräsentativ für das Integral ist.

3.2 Monte-Carlo Simulation

In Monte-Carlo Simulationen wird eine Folge von Konfigurationen des zu untersuchenden Systems erzeugt. Die Konfigurationen sollten mit einer Wahrscheinlichkeit verteilt sein, die proportional zum Boltzmannfaktor $\exp(-S_E)$ ist. Diese Forderung wird auch als *importance sampling* bezeichnet [16]. Für eine derart erzeugte Folge von Konfigurationen $C_i = C_1, \ldots, C_N$, ist der Erwartungswert einer Observablen annähernd gegeben durch,

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} O(C_i). \tag{3.11}$$

Eine Folge von Konfigurationen kann auf die unterschiedlichsten Arten erzeugt werden. So wäre es beispielsweise möglich, jede Konfiguration aufs neue aus Zufallszahlen zu ziehen und diese dann gemessen an der Wahrscheinlichkeit in die Folge aufzunehmen. Diese Methode ist jedoch extrem ineffektiv, da eine große Menge an Konfigurationen gezogen werden muss, damit eine hinreichende Anzahl in die Folge aufgenommen wird. Es ist also sinnvoll neue Konfigurationen aus den vorangegangenen durch einen geeigneten Update zu erzeugen, da sich die Wirkung in diesem Fall nicht dramatisch ändert. Der Rechenaufwand bleibt jedoch relativ groß, falls die gesamte Konfiguration nicht akzeptiert wird. Daher wird der Update in der Regel lokal vorgenommen, wodurch sich die Wirkung jeweils nur lokal ändert. Für einen kompletten Update wird an jedem Gitterpunkt ein lokaler Update vorgenommen, und die so erzeugte neue Konfiguration wird insgesamt akzeptiert. An die Folge der Konfigurationen und somit auch an die Art des Updates sind, damit die gewünschte Verteilung erzielt wird die folgenden Bedingungen gestellt. Zum ersten muss der Prozess ergodisch sein, was bedeutet, dass von jeder Startkonfiguration C jede beliebige andere Konfiguration C' in endlich vielen Schritten erreichbar ist. Desweiteren muss die *detailed balance* Bedingung erfüllt sein,

$$P(C)P(C \to C') = P(C')P(C' \to C). \tag{3.12}$$

$P(C)$ steht hierbei für die in 3.1 beschriebene Wahrscheinlichkeit für die Konfiguration C. Für die Übergangswahrscheinlichkeit $P(C \to C')$ gilt,

$$\sum_{C'} P(C \to C') = 1. \tag{3.13}$$

Eine mit diesen Bedingungen erzeugte Folge wird als Markov-Kette bezeichnet.

3.2.1 Markov Ketten

Für eine einzelne Konfiguration C lässt sich zwar die Wirkung, und damit auch der Boltzmannfaktor $\exp(-S_E)$ berechnen, jedoch nicht die Wahrscheinlichkeit für diese Konfiguration,

$$P(C) = \frac{e^{-S_E(C)}}{Z}, \tag{3.14}$$

da die Zustandssumme Z über sämtliche Konfigurationen $\{C_i\}$ läuft. Mit Hilfe eines Markov Prozesses kann eine Folge erzeugt werden, die gegen die tatsächlichen Wahrscheinlichkeiten konvergiert. Bei der Erzeugung einer Markov Kette hängt jede neue Konfiguration ausschließlich von der vorhergegangenen Konfiguration ab. Alle weiteren möglichen Parameter sind zufällig gewählt. Eine wichtige Voraussetzung an die Markov Kette ist, dass jede mögliche Konfiguration C_j von einer beliebigen Startkonfiguration C_i aus in endlich vielen Schritten erreicht werden kann. Diese Bedingung wird auch als Ergodizität bezeichnet, und lässt sich ausdrücken durch,

$$P_{ij}^{(N)} = \sum_{i_k} P_{ii_1} \cdot P_{i_1 i_2} \ldots P_{i_{N-1}j} \neq 0 \tag{3.15}$$

P_{ik} steht hierbei für die Wahrscheinlichkeit von Konfiguration C_i zu C_k überzugehen; $P_{ij}^{(N)}$ für die Wahrscheinlichkeit von C_i in N Schritten zu C_j überzugehen. Die Übergangswahrscheinlichkeiten hängen nicht von den Konfigurationen selbst, sondern von der Art des Updates ab. Die Wahrscheinlichkeit, C im N-ten Schritt einer Markov Kette zu erreichen, ist gegeben durch,

$$P_N(C) = \sum_{\{C_i\}} P(C_0 \to C_1) P(C_1 \to C_2) \ldots P(C_{N-1} \to C). \tag{3.16}$$

Die Summation läuft für jedes C_i außer C_0 über alle möglichen Konfigurationen des Systems. Die Abweichung von $P(C)$ nach N Schritten ist dann mit der Funktion,

$$\sigma_N = \sum_C |P_N(C) - P(C)| \tag{3.17}$$

messbar. Die Wahrscheinlichkeit, C in $N+1$ Schritten zu erreichen, ergibt sich aus (3.16) zu,

$$\sigma_{N+1} = \sum_{C'} P_N(C') P(C' \to C). \tag{3.18}$$

Für die Abweichung nach $N+1$ Schritten gilt daher,

$$\begin{aligned} \sigma_{N+1} &= \sum_C \left| \sum_{C'} \left(P_N(C') P(C' \to C) - P(C) \right) \right| && (3.19) \\ &= \sum_C \left| \sum_{C'} \left(P_N(C') P(C' \to C) - P(C) P(C \to C') \right) \right| && (3.20) \end{aligned}$$

$$= \sum_{C} \left| \sum_{C'} \left(P_N(C')P(C' \to C) - P(C') \right) P(C' \to C) \right| \qquad (3.21)$$

$$\leq \sum_{C} \sum_{C'} \left| P_N(C') - P(C') \right| P(C' \to C) \qquad (3.22)$$

Die zweite Gleichung (3.20) folgt aus (3.13) und (3.21) aus der *detailed balance* Bedingung (3.12). Die Summe über die Beträge in (3.22) kann nur gleich dem Betrag der Summe in (3.21) sein, wenn gilt $P_N(C) = P(C)$. Aus der Summation über C ergibt sich dann,

$$\sigma_{N+1} \leq \sigma_N. \qquad (3.23)$$

Diese Relation zeigt zwar, dass die Abweichungen von der eigentlichen Verteilung $P(C)$ mit der Anzahl der Schritte N kleiner werden, dies bedeutet jedoch nicht, dass sich mit jedem weiteren Zwischenschritt die Wahrscheinlichkeit $P_N(C)$ näher an $P(C)$ befindet. Für den verwendeten Update, der aus einer Konfiguration den nächsten Schritt in der Markov-Kette bildet, muss die *detailed balance* Bedingung erfüllt sein. Damit ist jedoch nicht direkt die Übergangswahrscheinlichkeit gegeben, wodurch eine gewisse Freiheit in der Wahl des Updates entsteht. Die Ergodizität hängt jedoch direkt von der Wahl des Updates ab.

3.2.2 Overrelaxation Update

Der in den hier durchgeführten Simulationen verwendete Update ist auch als Overrelaxations Update bekannt. Dieser Update besteht aus mehreren mikrokanonischen Updates gefolgt von einem Metropolisupdate. Der mikrokanonische Update ändert die lokale Wirkung nicht, wobei die lokale Wirkung durch (3.9) an einem einzelnen Gitterpunkt gegeben ist,

$$S_{lok} = -\beta \Phi_n \hat{\Phi}_n + (\Phi_n)^2 + \lambda \left((\Phi_n)^2 - 1 \right)^2 - \vec{h}\Phi_n. \qquad (3.24)$$

$\hat{\Phi}_n$ entspricht hier der Summation über alle nächsten Nachbarn von Φ_n. Eine Änderung der Richtung des Feldvektors, bei konstant bleibender Länge, lässt den zweiten und dritten Term in (3.24) invariant. Für einen mikrokanonischen Update $\Phi \to \Phi'$ muss also sowohl der Winkel zwischen Φ_n und $\hat{\Phi}_n$, als auch zwischen Φ_n und $\vec{h}$ konstant bleiben. Der mikrokanonische Update ist somit durch eine Spiegelung des Feldvektors Φ an der von $\vec{h}$ und $\hat{\Phi}$ aufgespannten Ebene gegeben,

$$\Phi \to \Phi' = \Phi - 2 \left(\Phi \cdot \vec{n} \right) \Phi. \qquad (3.25)$$

$\vec{n}$ ist der Normalenvektor zu der aufgespannten Ebene. Der mikrokanonische Update sorgt daher für eine größtmögliche Veränderung der Felder, ohne die lokale Wirkung

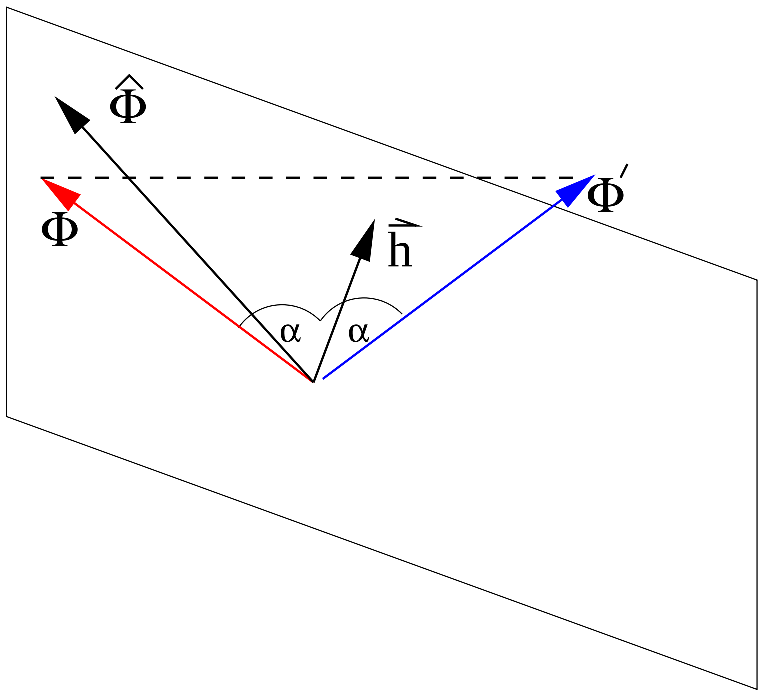

Abbildung 3.1: Darstellung des mikrokanonischen Updates.

zu verändern. Da für den lokalen mikrokanonischen Update die nächste Konfiguration durch eine eindeutige Spiegelung gegeben ist, gilt $P(C \to C') = 1$. Somit ist, weil sich die Wirkung nicht verändert, die *detailed balance* Bedingung (3.12) erfüllt. In den durchgeführten Simulationen wurden vor jeder Messung jeweils zehn mikrokanonische Updates gefolgt von einem Metropolisupdate durchgeführt. In der Metropolismethode wird eine kleine zufällige Änderung des Feldes vorgeschlagen, die mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit akzeptiert wird. Der Update im Metropolisalgorithmus muss mirkoreversibel sein. Das bedeutet, dass bei gegebener Konfiguration C für die Wahrscheinlichkeit, dass C' vorzuschlagen wird, gelten muss,

$$P_0(C \to C') = P_0(C' \to C). \tag{3.26}$$

Im Falle des $O(4)$-Modells, besteht der Update in der Addition eines vierdimensionalen Zufallsvektors, mit variabler Länge, zum momentanen Feldvektor. Sind die Zufallsvektoren auf der vierdimensionalen Kugeloberfläche gleichverteilt, so ist automatisch (3.26) erfüllt. Die Länge des Zufallsvektors ist so gewählt, das ca. 70% der vorgeschlagenen Konfigurationen C' akzeptiert werden. Die Bedingung für die Akzeptanz einer vorgeschlagenen Konfiguration lautet,

$$r < e^{\Delta S(C,C')}, \tag{3.27}$$

mit $\Delta S(C, C') = S(C) - S(C')$ und $r \in [0, 1]$ einer gleichverteilten Zufallszahl. Ist die Wirkung der neuen Konfiguration kleiner als die alte, so wird diese immer akzeptiert.

Für $\exp(\Delta S) < 1$ besteht eine von den Wirkungen abhängige Wahrscheinlichkeit, dass die neue Konfiguration dennoch akzeptiert wird. Klassische Systeme befinden sich immer im Minimum der Wirkung, die Bedingung (3.27) erlaubt jedoch Abweichungen vom Minimum. In diesem Sinne kann der Algorithmus als Erzeuger von Quantenfluktuationen betrachtet werden. Bleibt noch zu prüfen, ob der Metropolisupdate die *detailed balance* Bedingung erfüllt. Für $\exp(\Delta S) > 1$ gilt,

$$P(C \to C') = P_0(C \to C') \tag{3.28}$$

da C' in diesem Fall immer akzeptiert wird. Die Übergangswahrscheinlichkeit $P(C' \to C)$ ergibt sich aus der Multiplikation der Wahrscheinlichkeit, dass C vorgeschlagen wird mit der Akzeptanzwahrscheinlichkeit $\exp(\Delta S')$ (mit $\Delta S' = S(C') - S(C)$). Für $\exp(\Delta S) < 1$ ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit zu,

$$P(C \to C') = P_0(C \to C') \cdot e^{\Delta S} = P_0(C \to C') \frac{e^{-S(C')}}{e^{-S(C)}}. \tag{3.29}$$

Die umgekehrte Übergangswahrscheinlichkeit ist hier durch $P_0(C' \to C)$ gegeben, da sich die Akzeptanzwahrscheinlichkeit zu eins ergibt. Mit dieser Wahrscheinlichkeit und der Bedingung (3.26) lässt sich $P_0(C \to C')$ in (3.29) durch $P(C' \to C)$ ersetzen. Die *detailed balance* Bedingung ist also für $\exp(\Delta S) < 1$ erfüllt. Durch einen analogen Beweis lässt sich dies auch für $\exp(\Delta S) > 1$ zeigen.

3.3 Die Observablen

Die am häufigsten in Gitterrechnungen gemessenen Observablen sind die Korrelationsfunktionen $G(\tau)$. Im hier behandelten Modell ist es sinnvoll zwischen longitudinalen und transversalen Korrelationsfunktionen zu unterscheiden, da, wie in Kapitel 1.1.3 erwähnt, $G^{\parallel}$ das σ-Meson repräsentiert und $G^{\perp}$ die Pionen. Auf dem dreidimensionalen Gitter steht $G(\tau)$ für den Mittelwert aus den Korrelationsfunktionen in den drei Raumrichtungen,

$$G(\tau) = \frac{1}{3}\left(G(x) + G(y) + G(z)\right) \quad , \ |x| = |y| = |z| = \tau \tag{3.30}$$

wobei G für $G^{\parallel}$ bzw. $G^{\perp}$ steht. In der Regel wird die Korrelation zwischen den Ebenen senkrecht zur Korrelationsrichtung gemessen. Die Ebene Φ_x aus $G(x)$ ist definiert durch [17],

$$\Phi_x = \frac{1}{L^2} \sum_{y,z}^{L} \Phi_{(x,y,z)} \tag{3.31}$$

bei der Gittergröße L. Die Summe entspricht dann einer Projektion der transversalen Komponenten auf den Impuls $p_\perp = \vec{0}$ wie in (1.27). Der Erwartungswert der Felder wird gemessen durch,

$$\Phi = \frac{1}{V} \sum_{x,y,z}^{L} \Phi_{(x,y,z)} \tag{3.32}$$

mit $V = L^3$. Die Unterscheidung zwischen longitudinaler und transversaler Komponente erfolgt anhand der Ausrichtung des externen Feldes $\hat{h} = (1, 0, 0, 0)$. Die Ebenen $\Phi_i^{\|,\perp}$ und der Wert des Feldes Φ ergeben sich dann zu,

$$\Phi_i^{\|} = \Phi_i \cdot \hat{h} \tag{3.33}$$

$$\Phi_i^{\perp} = \Phi_i - \Phi_i \cdot \hat{h} \tag{3.34}$$

$$\Phi^{\|} = \Phi \cdot \hat{h}. \tag{3.35}$$

Da die Rotationssymmetrie im dreidimensionalen Unterraum der Pionfelder erhalten bleibt, gilt $\langle \Phi^\perp \rangle = 0$. Die verbundenen Korrelationsfunktionen, die in der MEM-Analyse verwendet werden sollen, ergeben sich mit (3.31) und (3.32) zu,

$$G^{\|}(\tau) = L^2 \left(\left\langle \Phi_0^{\|} \Phi_\tau^{\|} \right\rangle - \left\langle \Phi^{\|} \right\rangle^2 \right), \tag{3.36}$$

$$G^{\perp}(\tau) = \frac{L^2}{3} \left\langle \Phi_0^{\perp} \Phi_\tau^{\perp} \right\rangle. \tag{3.37}$$

Der Faktor L^2 gleicht den zusätzlichen Faktor aus den Integrationen über die transversalen Komponenten aus. Zur Bestimmung der kritischen Temperatur wird die longitudinale Suszeptibilität betrachtet, die definiert ist durch [10],

$$\chi_L = V \left(\left\langle \Phi^{\|2} \right\rangle - \left\langle \Phi^{\|} \right\rangle^2 \right). \tag{3.38}$$

Im Kontinuumlimes divergiert die Suszeptibilität bei der kritischen Temperatur T_c. Auf dem endlichen Gitter erreicht sie bei einer Temperatur $T_\star$ ihr Maximum. Aus mehren Werten $T_\star(L)$ kann, wie in Kapitel 3.6 beschrieben, die kritische Temperatur bestimmt werden.

3.4 Jackknife Methode

Der Fehler von Observablen, die aus Monte Carlo Daten gemessen werden, lässt sich über den Jackknife-Algorithmus bestimmen. Eine auf dem Gitter direkt messbare Observable X wird in Monte Carlo Simulationen durch den Mittelwert aller Messungen nach N Monte Carlo Schritten beschrieben,

$$X = \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} X_i. \tag{3.39}$$

Die einzelnen Messungen $X_1, \ldots X_N$ weisen hierbei natürlich Abweichungen vom Mittelwert auf, deren Varianz jedoch nicht als Fehler der gesamten Stichprobe angesehen werden sollte, da der Fehler in diesem Fall überschätzt würde. Vielmehr werden zur Bestimmung eines Fehlers die Abweichungen mehrerer Stichproben ähnlichen Umfangs benötigt. Um Rechenzeit zu sparen, empfiehlt es sich diese Stichproben aus dem vollen Umfang der Messung zu konstruieren. In der Jackknife-Methode wird die Originalstichprobe in B Blöcke des Umfangs M unterteilt. Für eine Funktionen T aus den Gittervariablen X ergeben sich dann die neuen Stichproben aus den Schätzungen $T_i = T_1, \ldots, T_B$, wobei T_i durch Weglassen des i-ten Blockes erzeugt wird [18]. Ziel des Jackknife Algorithmus ist es nun, eine bessere Schätzfunktion als T für die Observable zu finden, um Verzerrungen in der Stichprobe zu eliminieren. Hierzu werden zunächst die Jackknifeblöcke J_i gebildet,

$$J_i = BT - (B-1)T_i \,, \tag{3.40}$$

die auch als Pseudowerte des Jackknife bezeichnet werden. Der Jackknife selbst ergibt sich zu,

$$J = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} J_i. \tag{3.41}$$

Die Abweichungen vom tatsächlichen Erwartungswert sind für T proportional zu N^{-1} für J jedoch $\sim N^{-2}$. Der Fehler aus der Jackknife-Analyse ergibt sich zu,

$$\sigma^2 = \frac{1}{B(B-1)}\sum_{i}^{B}(J - J_i)^2. \tag{3.42}$$

Die Verzerrung einer Stichprobe D kann durch die Differenz zwischen T und dem Mittelwert der T_i abgeschätzt werden,

$$D = (B-1)\left(\frac{1}{B}\sum_{i}^{B} T_i - T\right). \tag{3.43}$$

Für den Jackknife gilt dann [18],

$$J = T - D. \tag{3.44}$$

3.5 Bearbeitung der Daten

In der Simulation werden nur die Observablen $\Phi_0\Phi_\tau$ und Φ gemessen, und nicht die Korrelationsfunktion (3.36) selbst. Für die MEM-Analyse wird jedoch eine Reihe von Messungen der Korrelationsfunktion benutzt. Deshalb wird aus mehreren Messungen von $\Phi_0\Phi_\tau^{(i)}$ und $\Phi^{(i)}$ der Erwartungswert gebildet, und zu einer Messung von $G(\tau)$ zusammengefasst,

$$G(\tau) = \frac{1}{M}\sum_i^M \Phi_0\Phi_\tau^{(i)} - \left(\frac{1}{M}\sum_i^M \Phi^{(i)}\right)^2 . \qquad (3.45)$$

Wird nur die Observable $\Phi_0\Phi_\tau$ für die MEM-Analyse verwendet, so entsteht in der Spektralfunktion ein hoher Peak beim ersten Wert ω_0. Die Likelihood-Funktion, die im Wesentlichen durch (2.15) gegeben ist, verlangt eine gaußartige Verteilung der Daten. In Monte Carlo-Simulationen ist dies normalerweise nicht gegeben. In der Regel existieren Korrelationen sowohl zwischen einzelnen Monte Carlo Schritten als auch zwischen den Abständen τ_i in der Korrelationsfunktion. Um Korrelationen in den einzelnen Monte Carlo Schritten zu reduzieren, werden oft mehrere aufeinander folgende Schritte zu einem *bin* zusammengefasst [14]. Die Abbildungen in 3.2 zeigen Histogramme der Daten, an die eine Gaußverteilung um den Mittelwert gefittet wurde. Die Bildung von *bins* geschieht hier bereits bei der Erzeugung der Korrelationsfunktionen nach (3.45). Daraus ergibt sich mit der *bin*-Anzahl B vom Umfang N die j-te Messung zu,

$$\begin{aligned} G(\tau)^{(j)} &= \frac{1}{N}\left(\sum_{i=j\cdot N+1}^{(j+1)\cdot N} \Phi_0\Phi_\tau^{(i)}\right) - \left(\frac{1}{N}\sum_{i=j\cdot N+1}^{(j+1)\cdot N} \Phi^{(i)}\right)^2 && (3.46)\\ &= \overline{\Phi_0\Phi_\tau}^{(j)} - \left(\overline{\Phi}^{(j)}\right)^2 && (3.47)\end{aligned}$$

wobei gilt $B \cdot N = M$. Der Mittelwert dieser B *bins* ist ungleich der Korrelationsfunktion (3.45), die aus sämtlichen Messungen erzeugt wurde. Die MEM-Analyse sollte aber eine Spektralfunktion erzeugen, die (3.45) reproduziert. Diese Verzerrung entsteht durch den zweiten Term in (3.46). Eine Möglichkeit diese Verzerrung aufzulösen ist, den zweiten Term für jedes *bin* durch den Erwartungswert aus der gesamten Messung $\langle\Phi\rangle$ zu ersetzen. Dies führt allerdings zu starken Fluktuationen in den Daten, da es sich bei den $\overline{\Phi_0\Phi_\tau}^{(j)}, \overline{\Phi}^{(j)}$ nicht um Jackknifeblöcke aus $N(B-1)$ Daten handelt, sondern um Blöcke des Umfangs N. Diese können großen Schwankungen zwischen unterschiedlichen *bins* unterliegen. Besser ist es nur einen Faktor des Terms durch den Erwartungswert zu ersetzen, und für den zweiten Faktor die Verzerrung nach (3.43) für das jeweilige *bin* zu berechnen. Der Mittelwert über die Blöcke $\overline{\Phi}^{(j)}$ ergibt dann wieder $\langle\Phi\rangle$. Die Verzerrung des j-ten Blocks ergibt sich zu,

$$D_j = \frac{(B-1)}{B}(\langle\Phi\rangle - \overline{\Phi}^{(j)}). \qquad (3.48)$$

Die Korrelationsfunktionen, auf denen die MEM-Analyse durchgeführt wird, werden dann durch die Blöcke,

$$G(\tau)^{(j)} = \overline{\Phi_0\Phi_\tau}^{(j)} - \langle\Phi\rangle \cdot \left(\overline{\Phi}^{(j)} - D_j\right) \qquad (3.49)$$

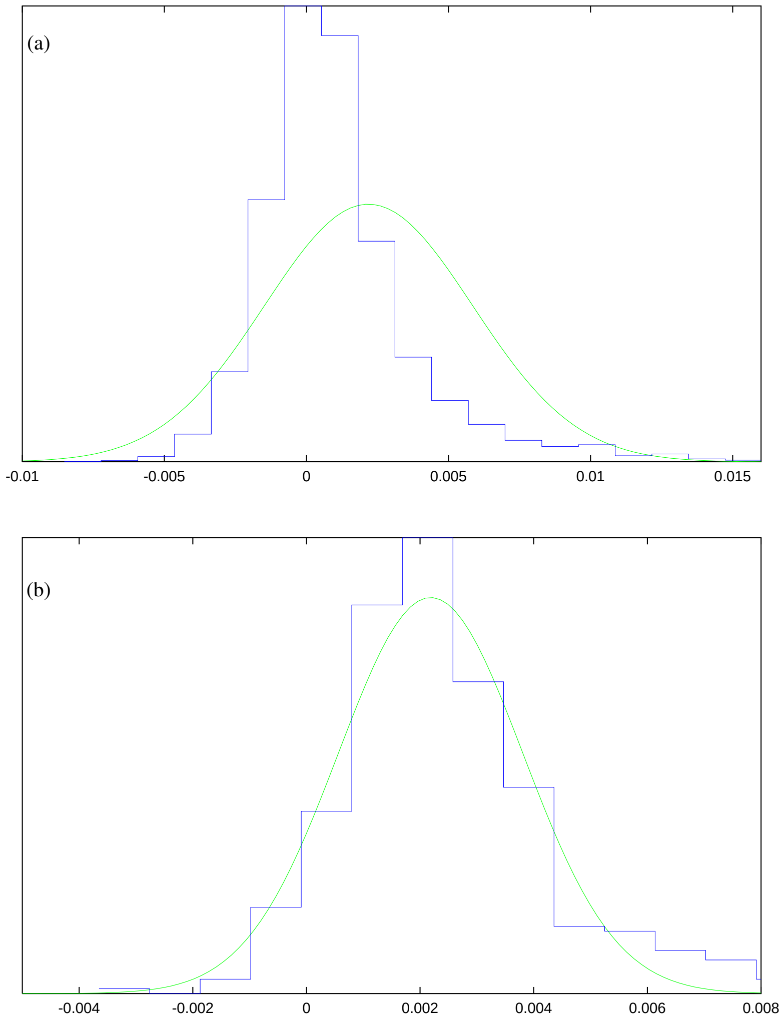

Abbildung 3.2: Histogramme der Daten bei τ = L/2. Mit ungemittelten (a) und gemittelten (b) Daten.

$$= \overline{\Phi_0\Phi_\tau}^{(j)} - \langle\Phi\rangle \cdot \left(\frac{2B-1}{B}\overline{\Phi}^{(j)} - \frac{B-1}{B}\langle\Phi\rangle\right) \tag{3.50}$$

$$= \overline{\Phi_0\Phi_\tau}^{(j)} - \frac{2B-1}{B}\overline{\Phi}^{(j)}\langle\Phi\rangle + \frac{B-1}{B}\langle\Phi\rangle^2 \tag{3.51}$$

beschrieben. An Gleichung (3.51) ist leicht zu erkennen, dass der Mittelwert über alle Blöcke wieder die Korrelationsfunktion (3.45) ergibt.

3.6 Die kritische Temperatur

Die Suszeptibilität (3.38) divergiert im Kontinuumslimes bei einer kritischen Temperatur T_c. Das Verhalten der Suszeptibilität lässt sich in einen regulären und einen singulären Anteil zerlegen, wobei der reguläre Anteil endlich bleibt. Am kritischen Punkt hängt der singuläre Anteil von dem kritischen Exponenten γ ab [12],

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}. \tag{3.52}$$

Dabei ist t gegeben durch,

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}. \tag{3.53}$$

Auf dem endlichen Gitter divergiert die Suszeptibilität nicht, wie schon aus der Definition (3.38) hervor geht. Jedoch erreicht diese Observable bei der Temperatur $T_\star(L)$ ihr Maximum. Es gilt [19],

$$\chi_{max} = L^{\gamma/\nu} Q(z_0) \tag{3.54}$$

mit der Skalenfunktion $Q(z)$, die bei z_0 ihr Maximum erreicht. Die Skalenfunktion hängt natürlich auch vom externen Feld bzw. der Quarkmasse ab, die hier allerdings konstant gehalten wird. In diesem Fall gilt $z = L^{1/\nu}t$, woraus folgt,

$$\frac{T_\star(L) - T_c}{T_c} L^{1/\nu} = z_0. \tag{3.55}$$

Für die Temperatur $T_\star(L)$ gilt dann,

$$T_\star(L) = T_c + \frac{\text{konst}}{L^{1/\nu}}. \tag{3.56}$$

Die Werte von $T_\star$ für verschiedene Gittergrößen beschreiben über $L^{-1/\nu}$ abgebildet eine Gerade, die für $L \to \infty$ bzw. $L^{-1/\nu} \to 0$ gegen T_c strebt.

Kapitel 4

Auswertung der Simulationsdaten.

Die Simulationen werden im Wesentlichen für zwei Gittergrößen $L = 16$ und $L = 24$ durchgeführt. Als Update wird der in Kapitel 3.2.2 beschriebene Overrelaxations Update, mit jeweils zehn mikrokanonischen Durchgängen gefolgt von einem Metropolis Durchgang, benutzt. Auf dem 16^3-Gitter werden Simulationen bei zwölf Werten der inversen Temperatur $\beta = 0.35, 0.36, \ldots, 0.45, 0.46$ durchgeführt, während auf dem 24^3-Gitter nur die Werte $\beta = 0.35, 0.36, \ldots, 0.43, 0.44$ simuliert werden. Die Stärke des äußeren Feldes der Wirkung (3.9) ist in allen Simulationen $h = 0.01$, und für den Parameter λ gilt immer $\lambda = 0.05$. Zur genaueren Bestimmung der kritischen Temperatur werden noch einige Zwischenstellen in der Nähe von β_c mit geringer Statistik gemessen, sowie Werte auf dem $L = 20$ Gitter. Diese konnten jedoch nicht zur Auswertung einer Spektralfunktion dienen. Als Eingabe für die MEM-Analyse werden jeweils zweihundert Messungen aus der $O(4)$-Simulation zu einem *bin* zusammengefasst. Die Jackknifeanalysen der Korrelationsfunktionen und der Suszeptibilität werden unter Verwendung von zehn Jackknifeblöcken durchgeführt.

4.1 Bestimmung von T_c

Die hier bestimmte kritische Temperatur ist nur als eine grobe Abschätzung, zur Unterscheidung zwischen gebrochener und symmetrischer Phase, zu sehen. Für eine genaue Bestimmung, wie in Kapitel 3.6 beschrieben, sollte die Differenz zwischen den Ausdehnungen des Gitters größer sein. Zusätzlich zu den für die MEM-Analyse durchgeführten Simulationen, gehen in die Bestimmung von T_c noch Simulationen an Zwischenstellen im β-Bereich und auf dem $L = 20$ Gitter ein. Abbildung 4.1 zeigt die longitudinale Suszeptibilität über der Temperatur T. Die Positionen der Maxima sind in Tabelle 4.1 aufgeführt. Der Fehler in Tab. 4.1 ist so gewählt, dass

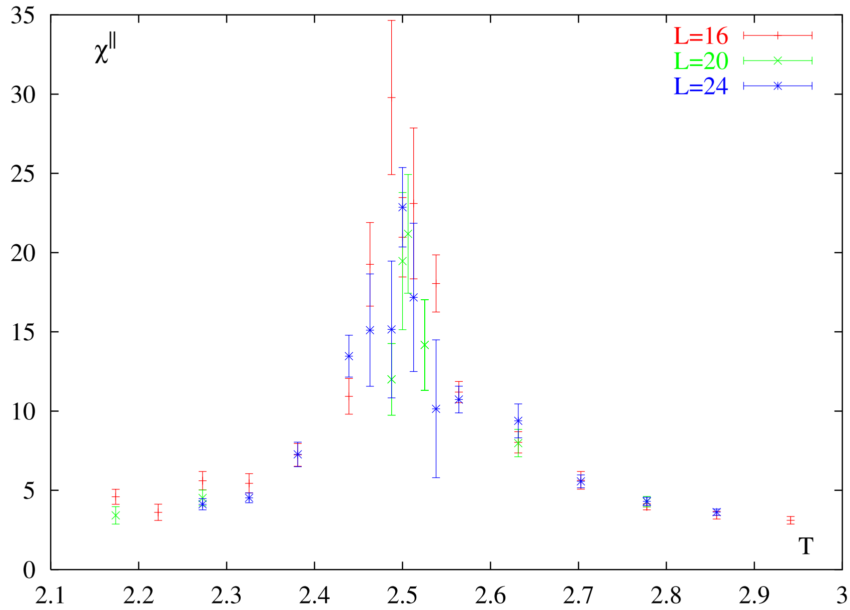

Abbildung 4.1: $\chi^{\|}$ für $L = 16, 20, 24$.

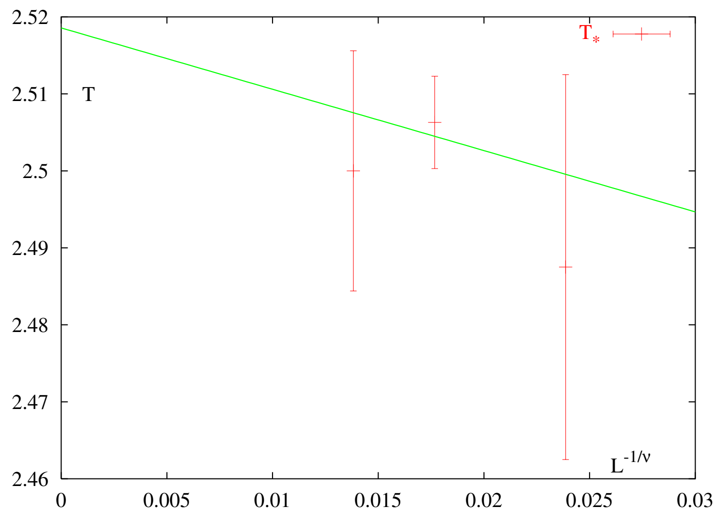

Abbildung 4.2: Fit von $T_\star$ über $L^{-1/\nu}$.

er alle Temperaturen enthält, die innerhalb der Fehler in $\chi^{\|}$ liegen. Der kritische Exponent ν ist in [10] zu $\nu = 0.7423$ bestimmt worden. Die kritische Temperatur wird nun anhand eines Geradenfits der Werte $T_\star$ über $L^{-1/\nu}$ ermittelt. Der Fit ergibt für den y-Achsenabschnitt und damit für die kritische Temperatur $T_c = 2.518 \pm 0.038$, woraus $\beta_c = 0.397$ folgt. Der in den Simulationen verwendete Wert $\beta = 0.40$ könnte innerhalb des Fehlers auch zur symmetrischen Phase gezählt werden. Im Folgenden wird $\beta = 0.40$ jedoch immer als Teil der gebrochenen Phase behandelt.

L	$\beta_\star$	$T_\star$	$L^{-1/\nu}$
16	0.402 ± 0.004	2.488 ± 0.025	0.02387
20	0.399 ± 0.001	2.506 ± 0.006	0.01767
24	0.400 ± 0.002	2.5 ± 0.016	0.01382

Tabelle 4.1: Temperaturen von $\chi^{\parallel}_{max}$

4.2 Spektralfunktionen im $L = 16$ Gitter

Auf dem $L = 16$ Gitter habe ich 80 000 Iterationen durchgeführt, wobei zur Messung der Korrelationsfunktion jeweils der Mittelwert über 10 Iterationen ausgegeben wird. Als Eingabe für die MEM-Analyse werden 20 solcher Messungen ($\hat{=}$200 Iterationen), wie in Kapitel 3.5 beschrieben, in einen *bin* umgewandelt. Abbildung 4.3 zeigt den Verlauf der Peaks der Spektralfunktionen über die Temperatur $T = 1/\beta$. Verwendet wurden hierbei die Werte $\beta = 0.35, 0.36, \ldots, 0.46$. Für $T > T_c$ sind die

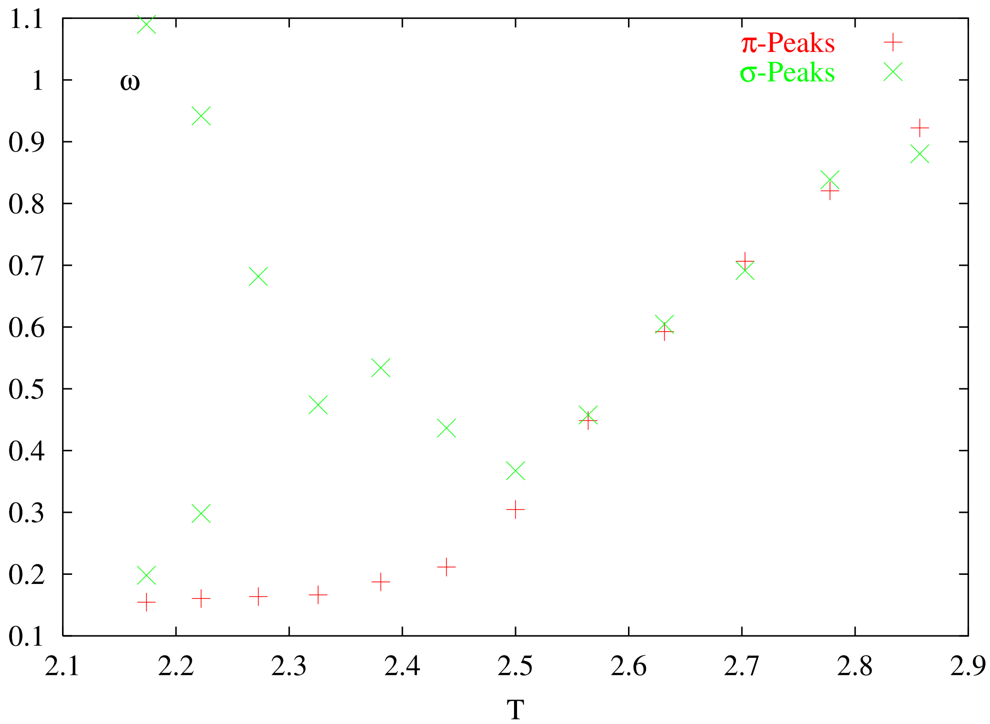

Abbildung 4.3: Peaks der Spektralfunktionen für L=16

Peaks der Pionenspektren und die des σ-Mesons nahezu an der selben Position. Bei kleineren Temperaturen unterscheiden sich die Peakpositionen von einander. Die letzten beiden Temperaturen, die zu den β-Werten 0.45 und 0.46 gehören, weisen zwei Peaks auf, wobei der Peak bei kleinerem ω sich etwa an der Position $\omega = 2 \cdot m_\pi$ befindet. Für $\beta = 0.46$ ist dies offensichtlich nicht der Fall. Die Betrachtung der Spektralfunktionen lässt dennoch die Deutung als Konzentration an der zweifachen Pionenmasse zu. Bei der Temperatur zu $\beta = 0.43$ ist die Peakposition niedriger als erwartet.

4.2.1 Die symmetrische Phase

In der symmetrischen Phase sind die Spektralfunktionen sowohl des Pions, als auch des σ-Mesons, durch relativ scharfe Peaks gegeben. Daraus folgt im Wesentlichen ein exponentieller Abfall der Korrelationsfunktionen $G^{\|}$ und $G^{\perp}$, wie in Abbildung 4.6 bzw. 4.7. Wie Abbildung 4.3 zeigt, verschiebt sich die Position des Maximums von $A(\omega)$ bei sinkenden Temperaturen bzw. steigenden Kopplungen zu niedrigeren Energien. Die Spektralfunktionen des Pions (Abbildung 4.5) haben in der symmetrischen Phasen für sämtliche Temperaturen einen extrem scharfen Peak, während die des σ-Mesons erst mit sinkender Temperatur an schärfe zunehmen. Hierbei könnte es sich allerdings auch um ein Statistikproblem handeln, da die longitudinalen Korrelationsfunktionen bei hohen Temperaturen für größere Abstände teilweise negativ werden. Bei höherer Statistik sollte dies nicht mehr der Fall sein.

Die Korrelationsfunktionen (Abbildung 4.6 und4.7) fallen wie erwartet exponentiell ab, woraus nach (2.1) wiederum eine δ-funktionsartige Spektralfunktion folgt. Für die transversalen Korrelationsfunktionen ist dieses Verhalten aus (2.33) ersichtlich. Die longitudinalen Korrelationsfunktionen sollten allerdings nach (2.40) zumindest in der gebrochenen Phase Abweichungen vom exponentiellen Verhalten aufweisen. Die Temperaturabhängigkeit der Spektralfunktionen, ist bereits in den unterschiedlichen Steigungen der logarithmierten Korrelationsfunktionen erkennbar.

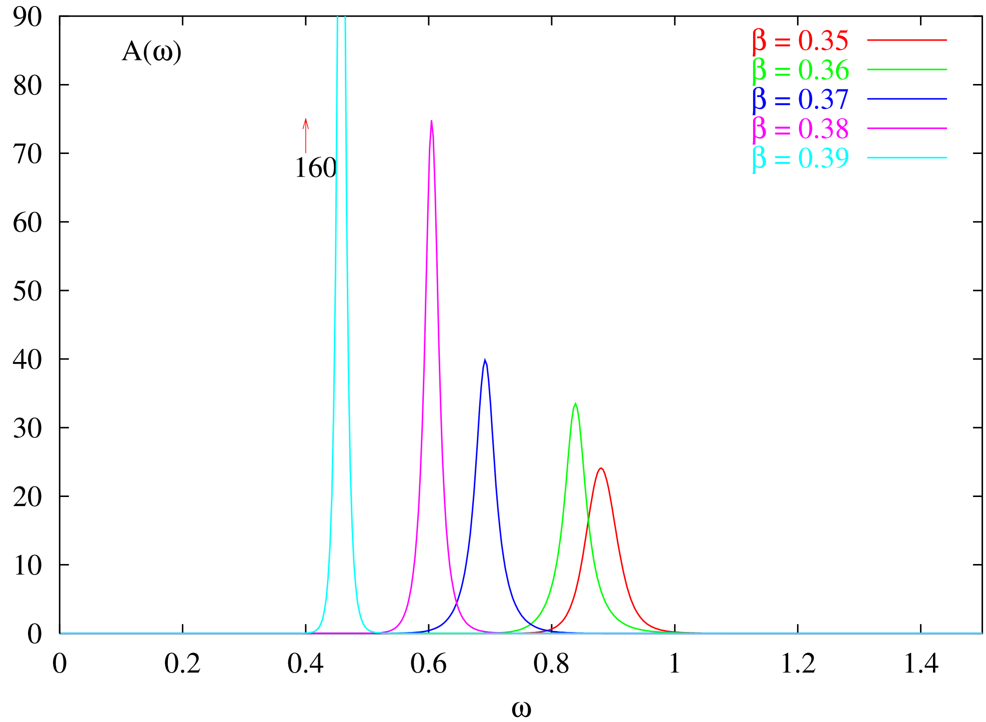

Abbildung 4.4: Spektralfunktionen des σ-Mesons für $T > T_c$, $L = 16$.

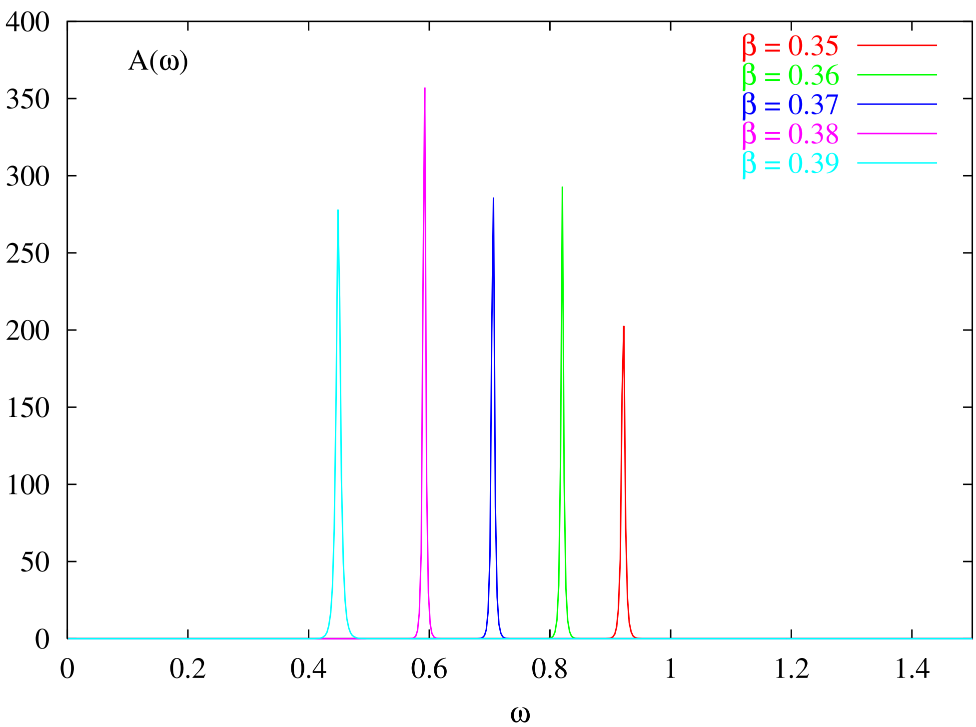

Abbildung 4.5: Spektralfunktionen des Pions für $T > T_c$, $L = 16$.

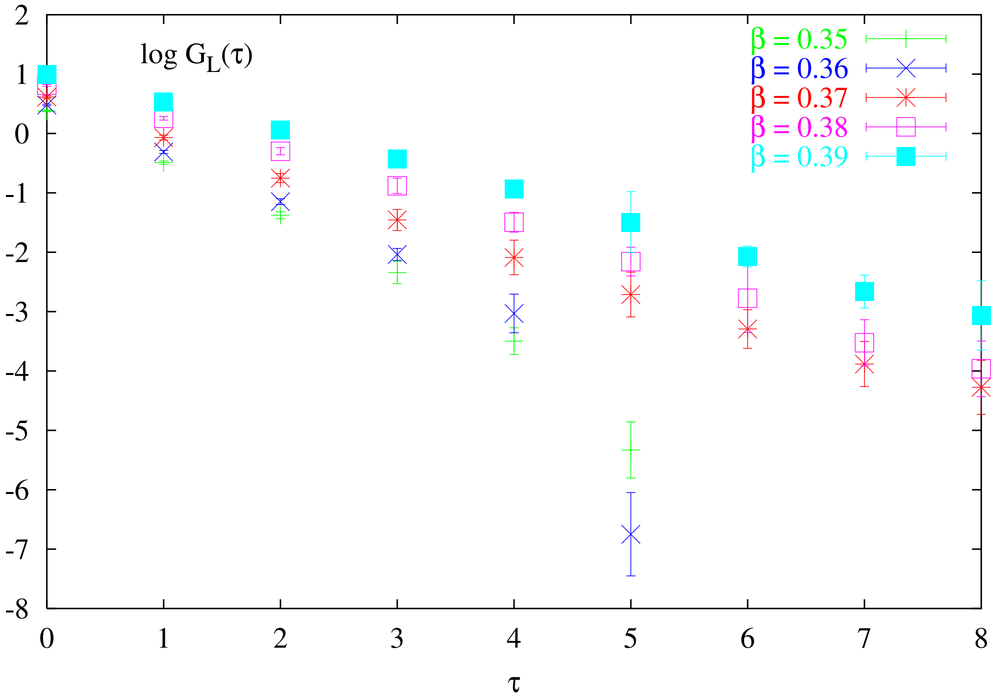

Abbildung 4.6: longitudinale Korrelationsfunktionen, $T > T_c$, $L = 16$.

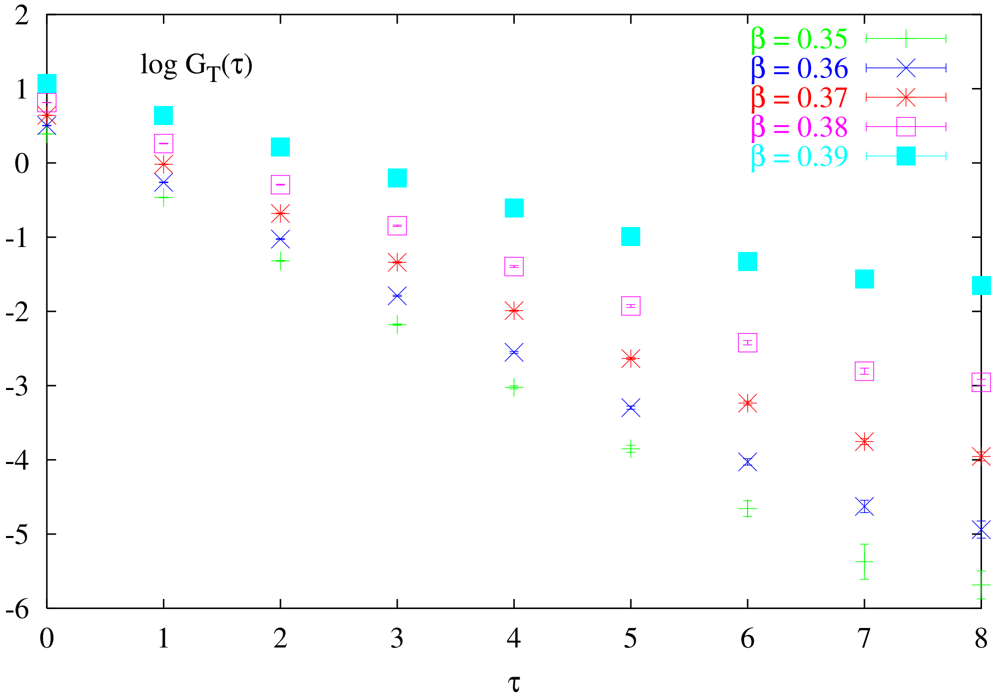

Abbildung 4.7: transversale Korrelationsfunktionen, $T > T_c$, $L = 16$.

4.2.2 Die gebrochene Phase

In der gebrochenen Phase werden die Spektralfunktionen stark durch den Zerfallsprozess $\sigma \longrightarrow 2\pi$ bestimmt. Dies führt zu einer Verbreiterung der Spektralfunktionen. Für niedrige Temperaturen, teilt sich die σ Spektralfunktion in zwei Peaks auf. Der zu der niedrigeren Energie gehörende Peak, kann als Konzentration der Spektralfunktion bei zweifacher Pionenmassen gedeutet werden [6]. Abbildung

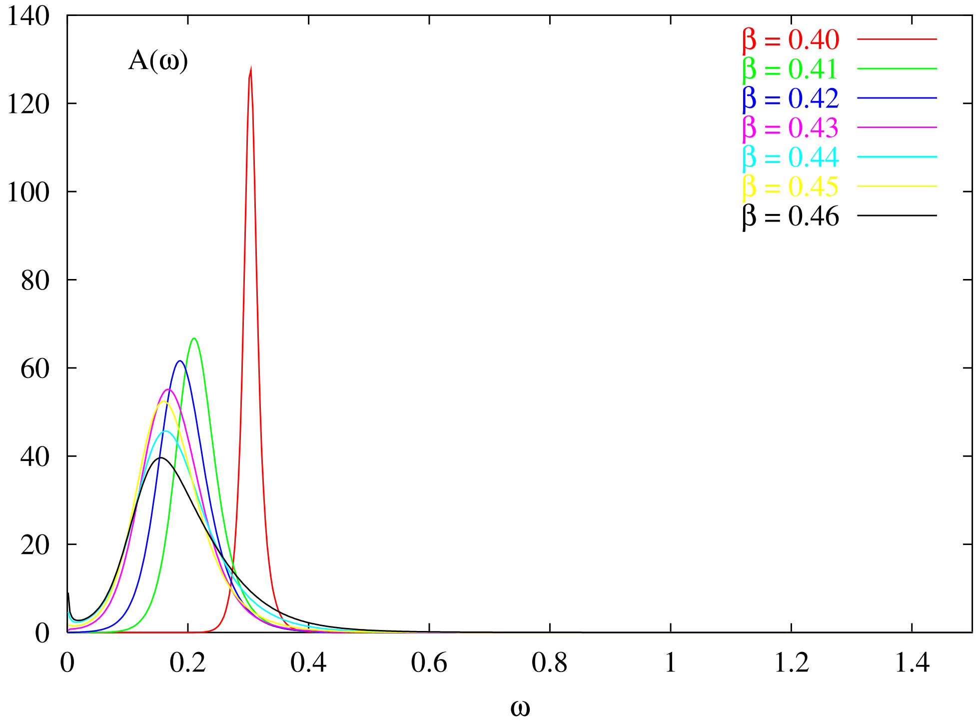

Abbildung 4.8: Spektralfunktionen der Pionen für $T < T_c$, $L = 16$.

4.8 zeigt deutlich die Verbreiterung des Pionenspektrums für Temperaturen, die den Zerfall $\sigma \longrightarrow 2\pi$ zulassen. Wie anhand von Abbildung 4.3 erkennbar, ist dies bereits für $\beta \geq 0.41$ der Fall. Die Spektralfunktionen des σ-Mesons in der gebrochenen Phase verbreitern sich ab einer Kopplung von ca. 0.42. Zwar liegt das Maximum der Spektralfunktion bereits für $\beta = 0.41$ bei $2m_\pi$, die MEM-Analyse ergibt an dieser Stelle jedoch nur einen extrem hohen Peak. Die Spektralfunktion der tieferen Temperaturen zeigen jedoch das erwartete breite Spektrum (Abbildung 4.10). Die Position des Maximum sollte sich für sinkende Temperatur zu höheren Energien verlagern. Abbildung 4.3 zeigt bei $\beta = 0.43$ ($T \approx 2.356$) eine Abweichung. Diese ist hauptsächlich auf das *ill posed* Problem zurückzuführen.

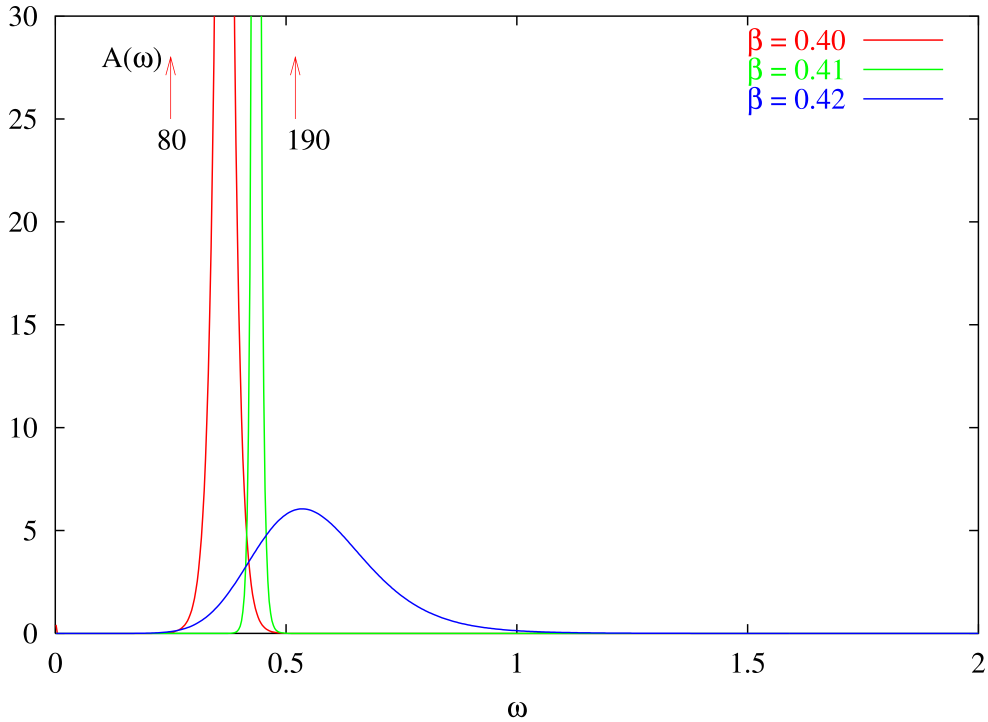

Abbildung 4.9: Spektralfunktionen des σ-Mesons nahe T_c, $L = 16$.

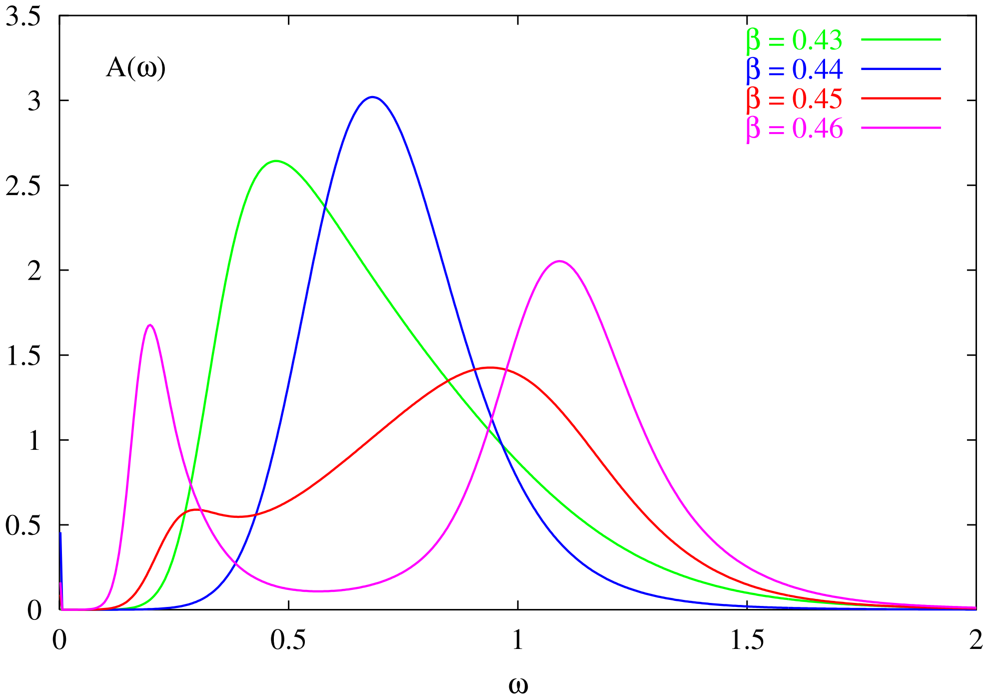

Abbildung 4.10: Spektralfunktionen des σ-Mesons für $T < T_c$, $L = 16$.

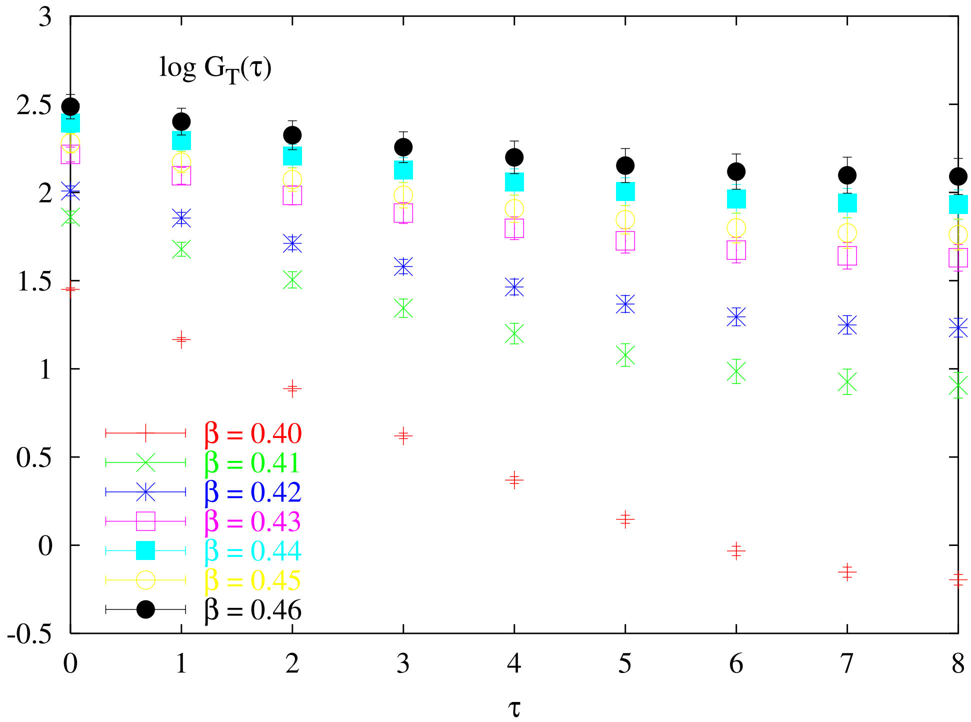

Abbildung 4.11: transversale Korrelationsfunktionen für $T < T_c$, $L = 16$.

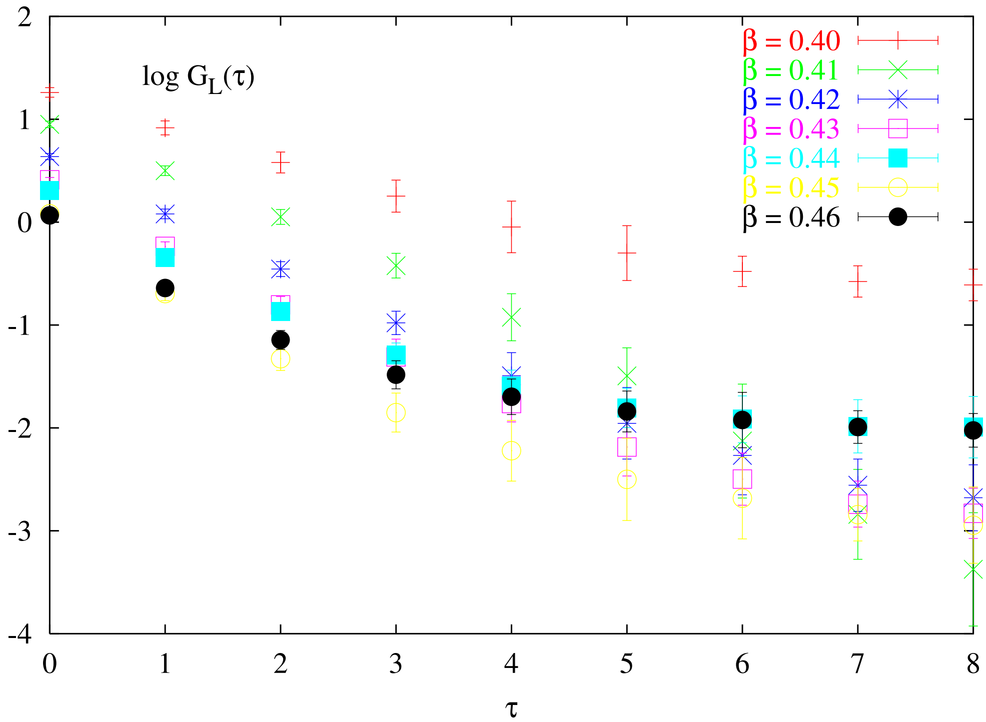

Abbildung 4.12: longitudinale Korrelationsfunktionen für $T < T_c$, $L = 16$.

Die transversalen Korrelationsfunktionen zeigen kaum erkennbare Abweichungen vom exponentiellen Verhalten. Allerdings fallen die Funktionen sehr schwach ab, woraus die Verbreiterung der Spektren resultiert, da Fluktuationen hier stärker ins Gewicht fallen. Die Korrelationsfunktionen sind, an eine Exponentialfunktion gefittet, im Anhang A.2 dargestellt. Die Korrelationsfunktionen des σ-Mesons weichen für $T \ll T_c$ wie erwartet deutlich von einem exponentiellen Verlauf ab. Die Spektralfunktionen des σ-Mesons weisen für die Werte $\beta = 0.45$ und 0.46 zwei Peaks auf. Bei der Energie $\omega \simeq 2m_\pi$ wird nach [6] eine Konzentration der Spektralfunktion erwartet. Für $\beta = 0.46$ sind die beiden Peaks relativ getrennt, was wieder durch das *ill posed* Problem verursacht wird, da die Korrelationsfunktion vom starken Abfall bei kurzen Abständen direkt in einen Verlauf $\sim \exp(-2m_\pi)$ übergeht. Eigentlich sollte die Spektralfunktion ähnlich wie die für $\beta = 0.45$ verlaufen, mit einer Konzentration bei $\omega \simeq 2\pi$ [1]. Abbildung 4.13 zeigt die Spektralfunktionen der σ-Mesonen über ω und die dazu gehörigen der Pionen über $2 \cdot \omega$ (bzw. $A(\omega/2)$ über ω). Für $\beta = 0.45$

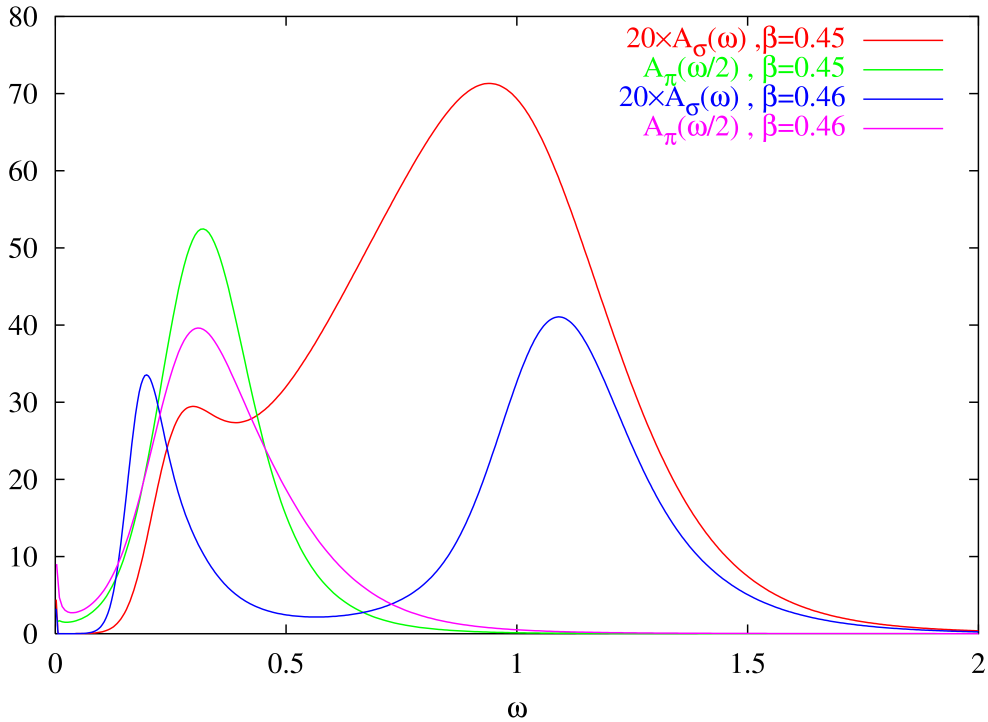

Abbildung 4.13: Konzentrations des σ-Spektrums bei $2m_\pi$, $L = 16$.

stimmt das Maximum der Spektralfunktion des Pions über $2 \cdot \omega$ gut mit dem ersten Maximum der σ-Spektralfunktion überein. Die Funktionen für $\beta = 0.46$ stimmen zwar nicht im Maximum überein, die Konzentration des σ-Mesons befindet sich jedoch innerhalb der Spektralfunktion A_π des Pions. Somit lassen sich beide Peaks als Folge des Zerfallsprozesses $\sigma \longrightarrow 2\pi$ interpretieren.

4.3 Spektralfunktionen im $L = 24$ Gitter

Auf dem $L = 24$ Gitter habe ich 60 000 Iterationen durchgeführt. Hierbei wird analog zum $L = 16$ Gitter jeweils über zehn Iterationen gemittelt, Als Eingabe für die MEM-Analyse werden ebenfalls 20 dieser Messungen zu einem *bin* zusammengefasst. Der Verlauf der Peakpositionen in Abhängigkeit von der Temperatur ist in Abbildung 4.14 dargestellt. Die Kopplungen zu den Temperaturen entsprechen

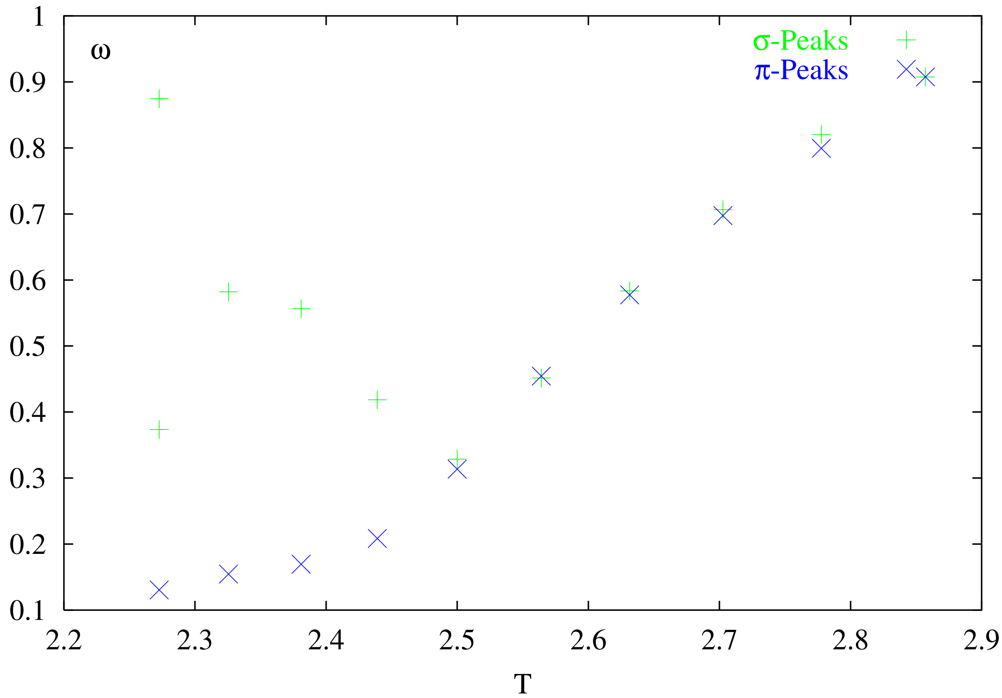

Abbildung 4.14: Peaks der Spektralfunktionen für L=24

$\beta = 0.35, 0.36, \ldots 0.44$. Wie auch für $L = 16$ ist die Symmetrie bei hohen Temperaturen auch auf dem $L = 24$ Gitter gut erfüllt. In der gebrochenen Phase unterscheiden sich die Peakpositionen. Dabei scheint der Wert bei $\beta = 0.43$ auch auf dem größeren Gitter zu niedrig zu sein. Ein zweiter Peak, der mit der Konzentration des Spektrums aus dem Zerfall $\sigma \longrightarrow 2\pi$ identifiziert werden kann, tritt hier bereits bei $\beta = 0.44$ auf. Die Spektralfunktionen der Pionen zeigen wie schon auf dem $L = 16$ Gitter den erwarteten Verlauf.

4.3.1 Die symmetrische Phase

Die Spektralfunktionen der Pionen ergeben sich, wie bereits für $L = 16$, zu scharfen Peaks, während die Spektralfunktionen der σ-Mesonen hier deutlich breiter sind. Die Temperaturabhängigkeit, wie in Abbildung 4.14 dargestellt, wird auch in Abb. 4.15 und 4.16 sichtbar.

Die Korrelationsfunktionen (Abbildungen 4.17 und 4.18) zeigen, dass es sich bei der Verbreiterung der Spektralfunktionen des σ-Mesons um ein Statistikproblem handeln könnte, da besonders bei hohen Temperaturen und größeren Abständen die Korrelationsfunktionen negativ werden*. Allerdings zeigt auch die Korrelationsfunktion zum Wert $\beta = 0.38$ Abweichungen vom Exponentialverhalten. Diese Abweichungen sind nicht auf (2.40) und damit auf das *default* Modell zurückzuführen, da die Steigung bei kurzen Abständen etwa mit der Steigung der transversalen Korrelationsfunktionen übereinstimmt. Eine $1/\tau$ Proportionalität würde jedoch zu größeren Steigungen bei kurzen Abständen führen. Die transversalen Korrelationsfunktionen stimmen vollständig mit den Erwartungen überein.

Die Spektralfunktionen sollten nicht von der Größe des Gittersabhängen. Die Positionen der Peaks stimmen in der symmetrischen Phase auch für beide Gittergrößen relativ gut überein (Abb. 4.4, 4.5 und 4.15, 4.16) . In der gebrochenen Phase ist dies für die σ-Mesonen nicht mehr der Fall.

*daher tauchen sie in der logarithmischen Darstellung nicht auf.

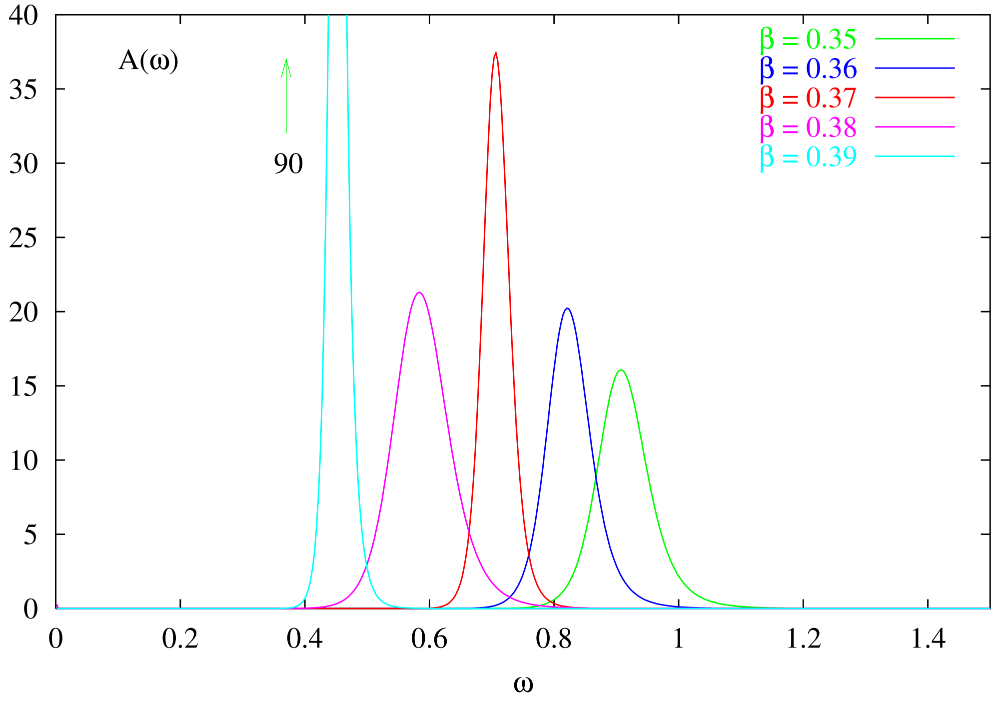

Abbildung 4.15: Spektralfunktionen des σ-Mesons für $T > T_c$, $L - 24$.

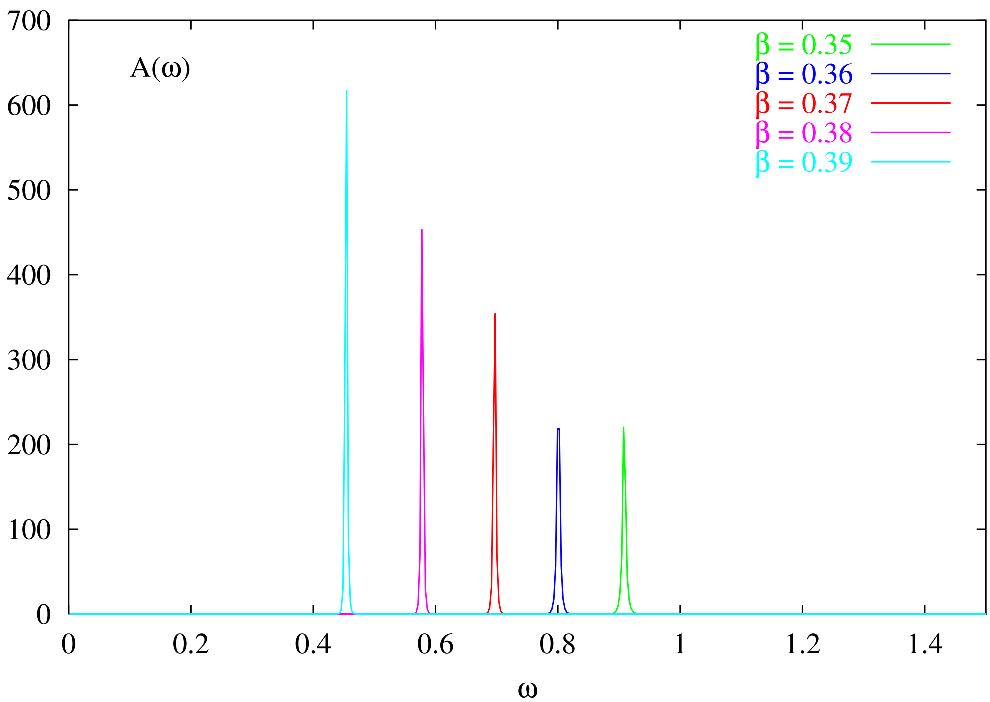

Abbildung 4.16: Spektralfunktionen des Pions für $T > T_c$, $L = 24$.

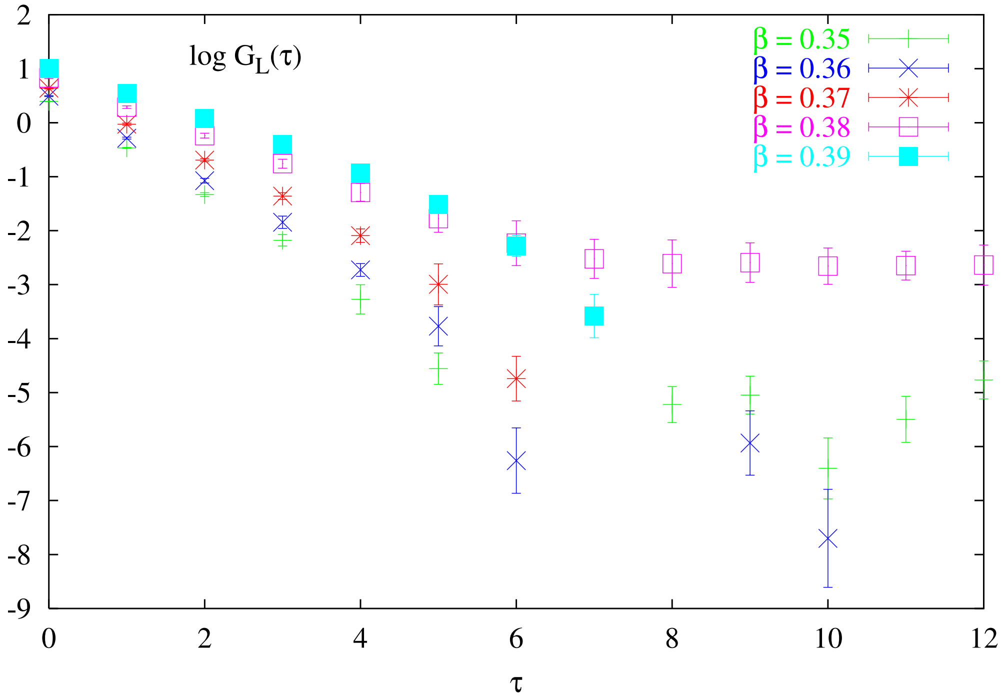

Abbildung 4.17: longitudinale Korrelationsfunktionen $T > T_c$, $L = 24$.

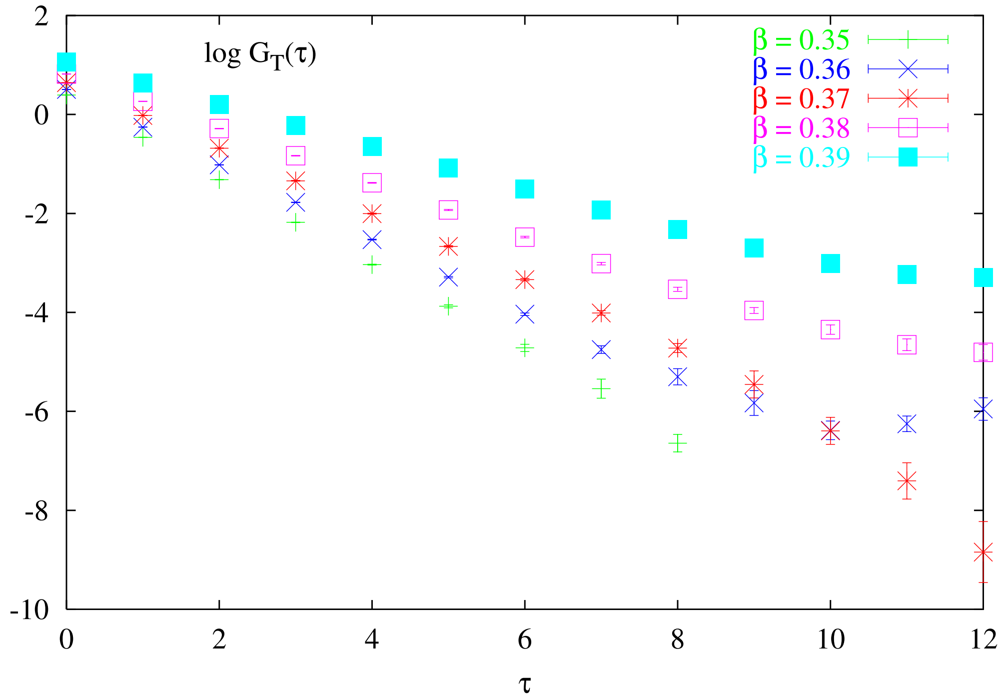

Abbildung 4.18: transversale Korrelationsfunktionen $T > T_c$, $L = 24$.

4.3.2 Die gebrochene Phase

Die Spektralfunktionen der Pionen zeigen, in der gebrochenen Phase, auch hier wieder eine Verbreiterung (Abb. 4.21). Für $\beta = 0.41$ ist die Funktion nur geringfügig breiter. Die höheren Kopplungen zeigen deutlich eine durch den Zerfallsprozess $\sigma \to 2\pi$ hervor gerufene Verbreiterung. Die Spektralfunktionen des σ-Mesons ha-

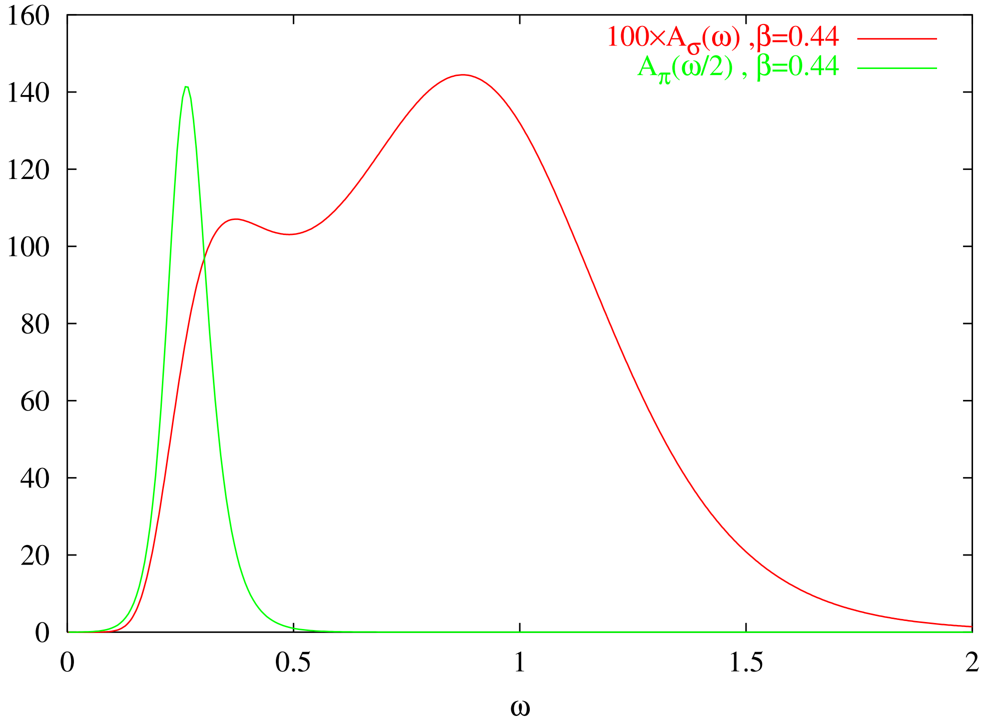

Abbildung 4.19: Konzentration des σ-Spektrums bei $2m_\pi$, $L = 24$.

ben für $\beta = 0.42$ und 0.44 die erwartete Breite. Bei $\beta = 0.43$ ist das Resultat hauptsächlich auf ein Statistikproblem zurück zu führen. Die Korrelationsfunktion verläuft im untersuchtem Bereich annähernd exponentiell, was zu dem relativ scharfen Peak führt. Beiträge zum Spektrum, die aus dem Verhalten der Korrelationsfunktion bei größeren Abständen folgen, und zu einer Verbreiterung führen könnten, zeigen hier erhebliche Abweichungen (die Korrelationsfunktion wird negativ). Die Spektralfunktion fällt hier auch nicht so schnell auf Null ab, wie die anderen Funktionen, sondern konvergiert zunächst gegen einen endlichen, wenn auch kleinen Wert. Auch der Verlauf der Korrelationsfunktion zeigt einige Unstimmigkeiten (Abb. 4.22). Demnach handelt es sich wohl auch um ein Statistik Problem.

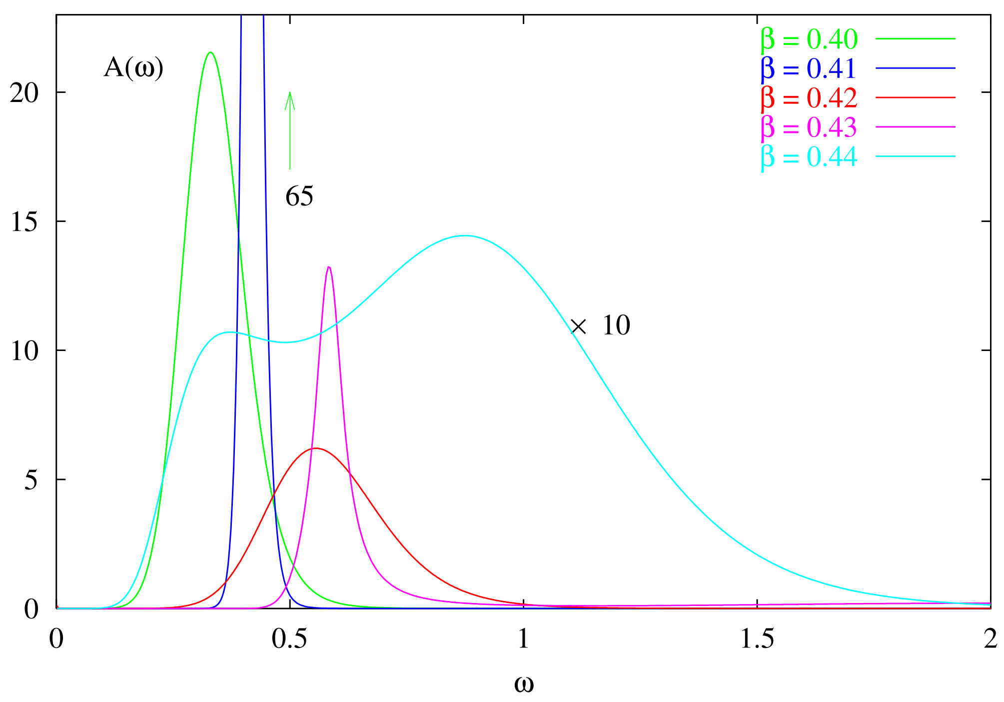

Abbildung 4.20: Spektralfunktionen des σ-Mesons für $T < T_c$, $L = 24$.

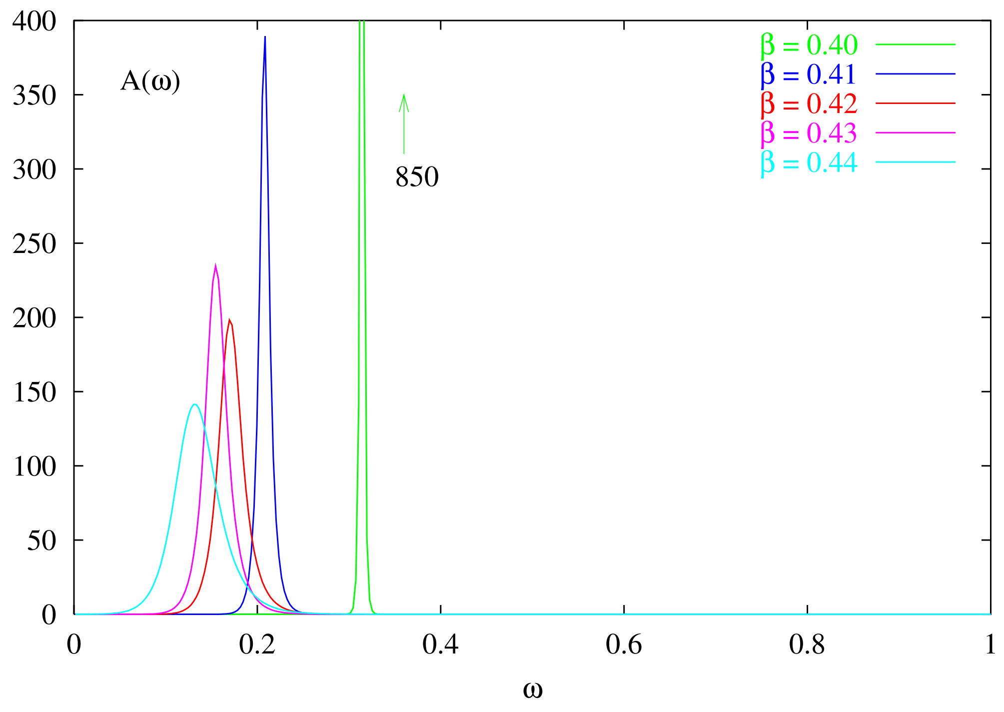

Abbildung 4.21: Spektralfunktionen des Pions für $T < T_c$, $L = 24$.

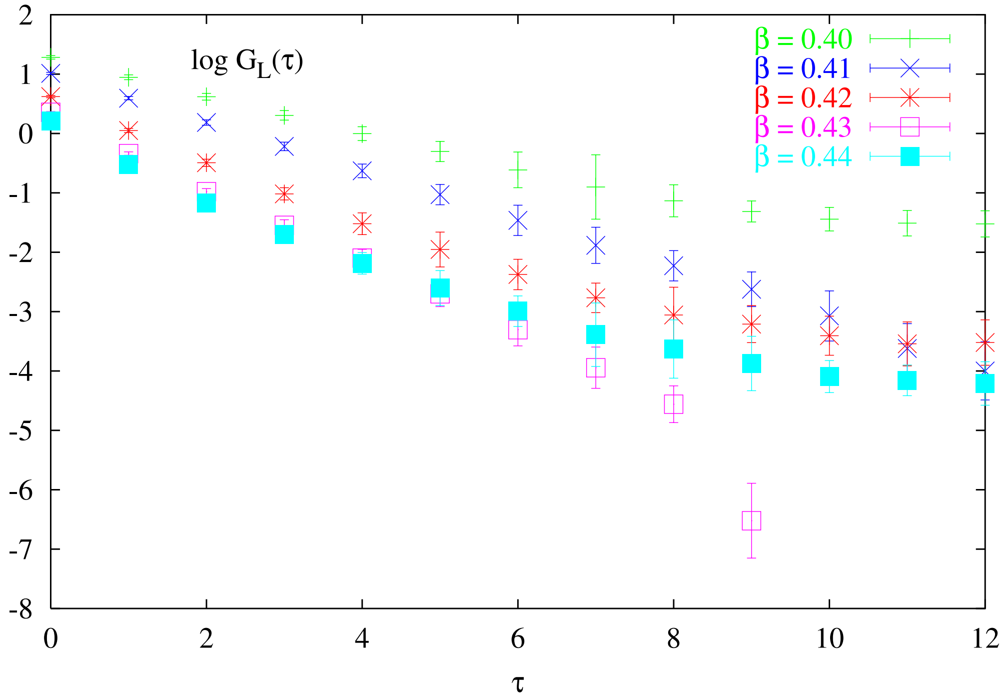

Abbildung 4.22: longitudinale Korrelationsfunktionen $T < T_C$, $L = 24$.

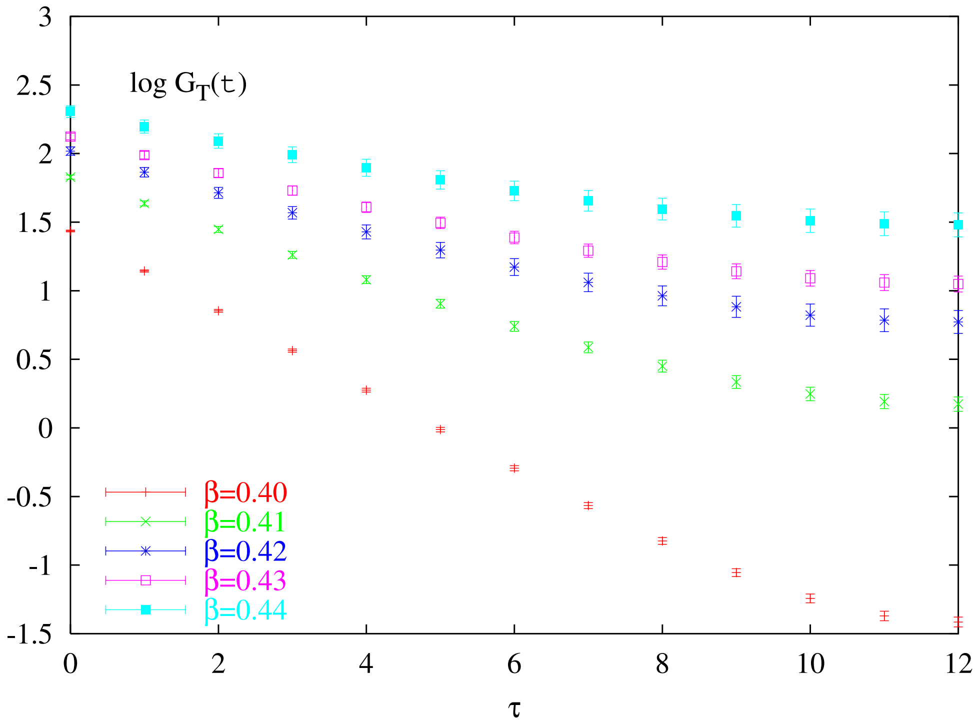

Abbildung 4.23: transversale Korrelationsfunktionen $T < T_c$, $L = 24$.

Für $\beta = 0.44$ ergibt sich ein zweiter Peak bei der Energie zweier Pionenmassen. Die Korrelationsfunktionen der β-Werte 0.42 bzw. 0.44 entsprechen den Erwartungen auf dem *default* Modell. Auch die transversalen Korrelationsfunktionen verhalten sich ähnlich wie auf dem $L = 16$ Gitter. Für tiefe Temperaturen fallen diese relativ schwach ab, was wiederum auf eine geringe Masse schließen lässt. Abbildung 4.3.2 zeigt die Spektralfunktionen für $\beta = 0.44$ des σ-Mesons über ω und die des Pions über die zweifache Energie. Die Positionen der Peaks stimmen zwar nicht exakt überein, die Spektralfunktion des σ-Mesons beginnt jedoch bei der doppelten Energie der Spektralfunktion des Pions. Der zur niedrigeren Energie gehörende Peak ist somit das Resultat des Zerfallsprozesses $\sigma \to 2\pi$.

4.4 Vergleich von $L = 16$ und $L = 24$

Wie in Kapitel 4.3.1 bereits erwähnt, sollten die Spektralfunktionen, die aus den Korrelationsfunktionen auf unterschiedlich großen Gittern erzeugt werden, die selbe Form haben. Die Spektralfunktionen in der symmetrischen Phase haben für beide Gittergrößen ähnliche Formen und Peakpositionen. Die Breite der Spektralfunktionen unterscheidet sich für die Pionen in der gebrochenen Phase insofern, dass für das $L = 24$ Gitter die Funktionen ein wenig schmaler sind. Der Verbreiterungseffekt tritt jedoch für beide Gittergrößen auf. Wesentliche Unterschiede ergeben sich für die Spektralfunktionen der σ-Mesonen in der gebrochenen Phase. Kopplungen nahe am kritischen Punkt unterscheiden hier ebenfalls kaum, wie in Abbildung 4.24 für $\beta = 0.42$ zu sehen. Für die Kopplung $\beta = 0.44$ (Abb. 4.25) liefert die MEM-Analyse auf dem $L = 24$ zwei Peaks, auf dem $L = 16$ Gitter jedoch nur einen. Dies ist ein typisches Beispiel für das *ill posed* Problem,da die 8 Datenpunkte, die auf dem $L = 16$ Gitter in der MEM-Analyse verwendet werden, nicht ausreichen, um derartige Feinheiten der Spektralfunktion zu berechnen. Bei kleineren Kopplungen liegen die Peaks dichter an einander, sodass hier zwei in der echten Spektralfunktion eigentlich getrennte Peaks eher als ein breiter Peak ausgewertet werden. Dies ist wohl auch der Grund dafür, dass bei der Kopplung $\beta = 0.43$ für keine Gittergröße eine zufriedenstellende Spektralfunktion berechnet werden konnte.

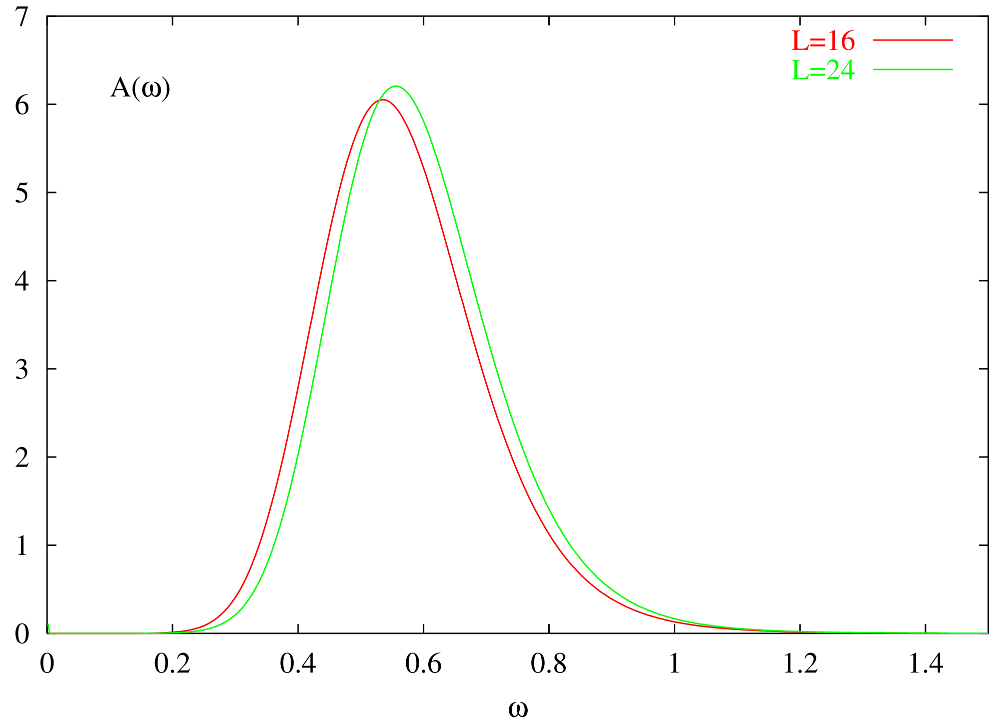

Abbildung 4.24: Spektralfunktionen für $\beta = 0.42$ im $L = 16$ und $L = 24$ Gitter.

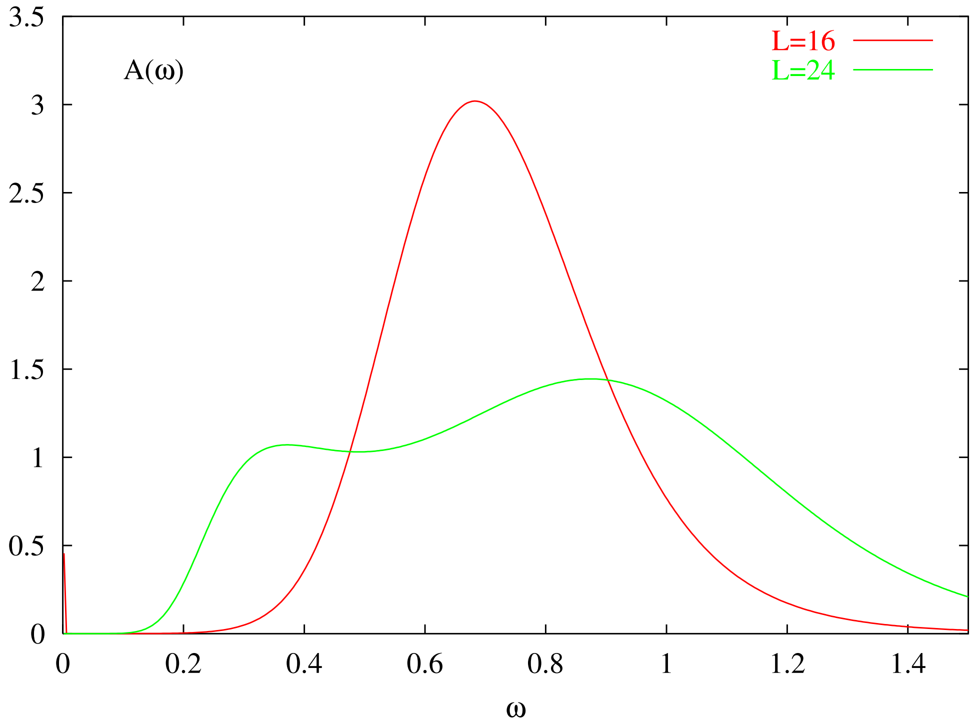

Abbildung 4.25: Spektralfunktionen für $\beta = 0.44$ im $L = 16$ und $L = 24$ Gitter.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden die Spektralfunktionen des σ-Mesons und des Pions im chiralen Phasenübergang untersucht. Als effektives Modell der QCD wurde das $O(4)$-symmetrische lineare Sigma-Modell in drei räumlichen Dimensionen verwendet. Untersucht wurden die Abhängigkeit der Spektralfunktionen von der Temperatur T bzw. der Kopplung β.

Bei niedrigen Temperaturen sollte in der gebrochenen Phase ein Anstieg von m_σ beobachtet werden, während m_π gegen einen endlichen Wert konvergiert. Für hohe Temperaturen sollte die Symmetrie $m_\sigma = m_\pi$ wiederhergestellt sein. Für die Spektralfunktionen der Pionen ist die erwartete Temperaturabhängigkeit in beiden Phasen gut erfüllt.
Die Spektralfunktionen der σ-Mesonen zeigen zum Teil Abweichungen von diesem Verhalten, die auf zu niedrige Statistik und das ill-posed Problem zurückzuführen sind. Allgemein sind sie Massen der σ-Mesonen in der gebrochenen Phase immer größer als die der Pionen. Die Abweichungen treten auf, sobald der Zerfallsprozess $\sigma \to 2\pi$ möglich wird. Für tiefere Temperaturen entspricht die Temperaturabhängigkeit der Spektralfunktionen wieder etwa den Erwartungen.
Die Verbreiterung der Spektralfunktionen des Pions in der gebrochenen Phase konnte sowohl auf dem $L = 16$ als auch auf dem $L = 24$-Gitter eindeutig bestätigt werden. Die Verbreiterung setzt genau dann ein, wenn die Masse des σ-Mesons doppelt so groß wird, wie die des Pions. Dies ist bei einer Kopplung von $\beta = 0.41$ der Fall. In der symmetrischen Phase ergeben sich wie erwartet scharfe Peaks.
Die Spektralfunktionen des σ-Mesons sind in der gebrochenen Phase wie erwartet relativ breit. Für einige Werte der Kopplung war das Ergebnis der MEM-Analyse jedoch nicht nicht unbedingt zufriedenstellend, da die Korrelationsfunktionen nicht für genügend große Abstände berechnet wurden. Bei tieferen Temperaturen ist eine Konzentration der Spektralfunktion bei $\omega \simeq 2m_\pi$ jedoch deutlich erkennbar. In der symmetrischen Phase sind die Spektralfunktionen ebenfalls durch Peaks gegeben, jedoch sind diese weniger scharf als für die Pionen.
Der Vergleich der Spektralfunktionen aus Korrelationsfunktionen mit unterschiedlicher Gittergröße ergab, dass die einfachen Spektralfunktionen, die nur aus einem Peak bestehen, relativ unabhängig von der verwendeten Gittergröße sind. Dies ist

in der symmetrischen Phase für alle Spektralfunktionen der Fall,sowie in der gebrochenen Phase für die der Pionen. Kompliziertere Spektralfunktionen, wie die der σ-Mesonen in der gebrochenen Phase, sind vom *ill posed* Problem betroffen.

Anhang A

A.1 Konstanten des *default*-Modells

β	$m_0^{\perp}$ für$L = 16$	$m_0^{\parallel}$ für $L = 16$	$m_0^{\perp}$ für $L = 24$	$m_0^{\parallel}$ für $L = 24$
0.35	$7.6538 \cdot 10^{-4}$	$2.3639 \cdot 10^{-6}$	$3.8607 \cdot 10^{-3}$	$9.0808 \cdot 10^{-7}$
0.36	$4.3506 \cdot 10^{-3}$	$2.1829 \cdot 10^{-6}$	$4.2546 \cdot 10^{-3}$	$8.1019 \cdot 10^{-7}$
0.37	$4.8731 \cdot 10^{-3}$	$1.6076 \cdot 10^{-6}$	$4.8259 \cdot 10^{-3}$	$6.6060 \cdot 10^{-7}$
0.38	$5.9899 \cdot 10^{-3}$	$1.2995 \cdot 10^{-6}$	$5.7768 \cdot 10^{-3}$	$4.4706 \cdot 10^{-7}$
0.39	$7.3169 \cdot 10^{-3}$	$1.093 \cdot 10^{-6}$	$7.3453 \cdot 10^{-3}$	$4.7228 \cdot 10^{-7}$
0.40	$1.0931 \cdot 10^{-2}$	$8.6929 \cdot 10^{-7}$	$1.0729 \cdot 10^{-2}$	$3.2565 \cdot 10^{-7}$
0.41	$1.5625 \cdot 10^{-2}$	$2.4310 \cdot 10^{-6}$	$1.560ß \cdot 10^{-2}$	$8.0153 \cdot 10^{-7}$
0.42	$1.8769 \cdot 10^{-2}$	$4.5716 \cdot 10^{-6}$	$1.8845 \cdot 10^{-2}$	$1.8879 \cdot 10^{-6}$
0.43	$2.0826 \cdot 10^{-2}$	$6.9456 \cdot 10^{-6}$	$2.0929 \cdot 10^{-2}$	$3.5128 \cdot 10^{-6}$
0.44	$2.2331 \cdot 10^{-2}$	$7.1850 \cdot 10^{-6}$	$2.2484 \cdot 10^{-2}$	$4.2098 \cdot 10^{-6}$
0.45	$2.3684 \cdot 10^{-2}$	$1.2402 \cdot 10^{-5}$		
0.46	$2.4703 \cdot 10^{-2}$	$9.8162 \cdot 10^{-6}$		

A.2 Korrelationsfunktionen der Pionen für $T >$ bzw $< T_c$

An die Korrelationsfunktionen in der symmetrischen ($\beta = 0.36$) und gebrochenen ($\beta = 0.44$) Phase, wurden hier, in logarithmischer Darstellung, für kurze Abstände (τ = 0-4) Exponentialfunktionen gefittet. Die Abweichungen bei großen Abständen sind auf das endliche Gitter zurückzuführen. Beide Korrelationsfunktionen fallen exponentiell ab, jedoch sind die Fluktuationen in der gebrochenen Phase wesentlich stärker, was zu der Verbreiterung der Peaks führt, da mehrere Spektralfunktionen eine gute Rekonstruktion der Korrelationsfunktion liefern.

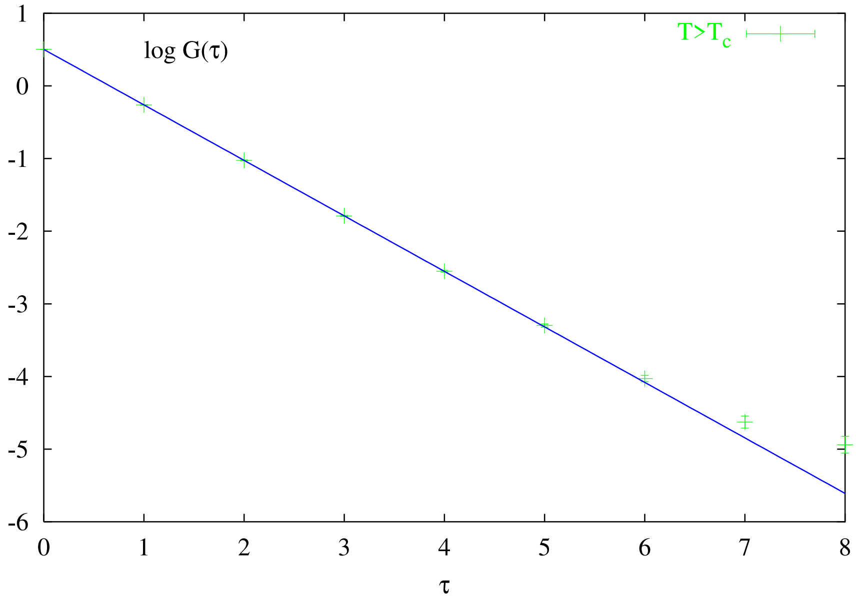

Abbildung A.1: Geradenfit an $\log G^{\perp}(\tau)$ für $T > T_c$.

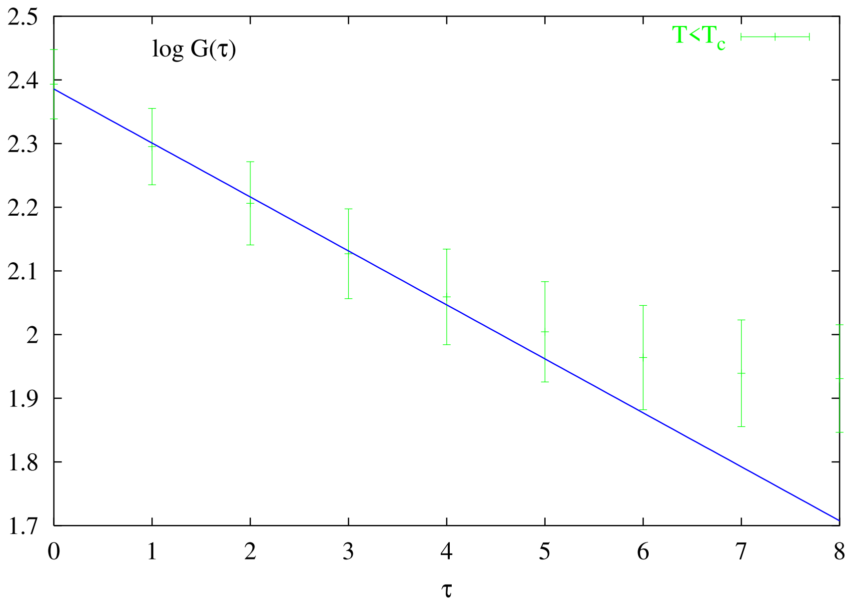

Abbildung A.2: Geradenfit an $\log G^{\perp}(\tau)$ für $T > T_c$.

Literaturverzeichnis

[1] T. Hatsuda, T. Kunihiro, *Chiral Symmetry Restoration and the σ-meson*, `hep-ph/001039`.

[2] M. E. Perskin, D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Perseus Book Publishing (1995).

[3] Y. Nambu ,G. Jona-Lasinio, *Dynamical Model of Elementary Particles Based on an Analogy with Superconductivity*, Phys. Rev.**122**,345 (1961).

[4] F. Karsch, *Lattice QCD at high temperature and density*, `hep-lat/0106019` .

[5] K. Rajagopal, F. Wilczek, *Static and Dynamic Critical Phenimena at a Second Order Phase Transition*, Nucl. Phys. **B 399** (1993) 395.

[6] T. Hatsuda, T. Kunihiro, *The σ-meson and π-π Correlation in Hot/Dense Medium: soft modes for chiral transition in QCD*, `nucl-th/0112027` .

[7] T. Hatsuda, T. Kunihiro, H. Shimizu, *Precursor of Chiral Symmetry Restoration in Nuclear Medium*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 2840.

[8] T. Kunihiro, *The Sigma Meson and Chiral Transition in Hot and Dense Matter*, `hep-ph/0111121`.

[9] A. Hasenfratz, K. Jansen, C. B. Lang, T. Neuhaus, H. Yoneyama, *Study of the 4-component Φ^4 model*, Nucl. Phys. **B 317** (1989) 81-96.

[10] J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes, T. Schulze , *Finite Size scaling functions for 3d O(4) and O(2) spin models and QCD*, `hep-lat/0105028`.

[11] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, Oxford University Press Inc. , New York (1998).

[12] K. Huang, *Statistical Mechanics 2.Ed.*, John Wiley & Sons (1987).

[13] G. Kane, *Modern Elemantary Partical Physics*, Addison-Wesley Publishing Comp. (1987) .

[14] R. K. Bryan, *Maximum entropy analysis of oversampled data problems*, Eur. Biophys. J. (1990) 18:165-174.

[15] M. Jarrell, J. E. Gubernatis, *Bayesian Interference and the analytic Continuation of imaginary Time Quantum Monte Carlo Data*, Elsevier (1995).

[16] H.J. Rothe, *Lattice Gauge Theories An Introduction*, World Scientific (1992).

[17] M. Caselle, M. Hasenbusch, *Universal amplitude ratios in the three-dimensional Ising model*, J. Phys. A: Math Gen. **30** (1997) 4963-4982.

[18] J. Engels, *Statistische und Stochastische Methoden der Physik*, Vorlesungsskript Universität Bielefeld.

[19] M. Oevers, *Kritisches Verhalten in O(4)-symmetrischen Spinmodellen und 2-flavour QCD*, Diplomarbeit Universität Bielefeld (1996).

[20] L. Fromme, *Goldstone Effekte und Korrelationslängen des drei dimensionalen O(4)-Modells*, Diplomarbeit Universität Bielefeld (2002).

[21] A. Z. Patashinskiĭ , V. L. Pokrovskiĭ, *Longitudinal susceptibility and correlations in degenerate systems*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **64** (1973) 1445-1451.

[22] Ph. Blanchard, E. Brüning, *Distributionen und Hilberträume*, Springer-Verlag Wien (1993).

[23] P. Ginsparg, *Fist and Second Order Phase Transitions in Gauge Theories at Finite Temperatur*, Nucl. Phys. **B 170** (1980) 388-408.

[24] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch (1971).

[25] F. Oberhettinger, *Tabellen zur Fourier Transformation*, Springer Verlag (1957).

[26] I. S. Gardshteyn, I. M. Ryzhik, *Tabels of Integrals, Series and Products*, Academic Press Inc. (1965).

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter der Anleitung von Prof. Dr. Frithjof Karsch erstellt. Ich danke Prof. Dr. Karsch für die gute Betreuung und die Bereitschaft stets auf Fragen einzugehen. Ich danke auch für die wichtigen Hinweise, die stets zu einen tieferen Verständnis geführt haben.

Desweiteren möchte ich mich für die angenehme Atmosphäre auf der Etage bedanken. Insbesondere bei Felix, Jörg, Santo und Matthias.

Hiermit versichere ich, dass ich zur Erstellung der Arbeit, keine weiteren Hilfsmittel als die im Literaturverzeichnis aufgeführten Quellen verwendet habe.