

Goldstone-Effekte und Skalenfunktionen in der
QCD mit zwei leichten adjungierten
Quark-Flavours

Dissertation

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Thomas Schulze

1. Oktober 2004

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	7
1 QCD mit adjungierten Fermionen	9
1.1 QCD im Kontinuum	9
1.2 Die adjungierte Darstellung der $SU(3)$	10
1.3 Symmetrien von QCD und aQCD	11
1.4 QCD bei endlicher Temperatur	14
1.5 QCD auf dem Gitter	14
1.5.1 Diskretisierung der Eichwirkung	15
1.5.2 Die naive Diskretisierung der Fermionwirkung	16
1.5.3 Kogut-Susskind Fermionen	17
1.5.4 Die chirale Symmetrie der Kogut-Susskind Fermionen	19
1.5.5 Die Fermionwirkung mit adjungierten Fermionen	20
1.6 Observablen	22

2	Die $O(N)$-Spinmodelle	25
2.1	Wirkung und Observablen	25
2.2	Kritisches Verhalten	27
2.3	Skalenfunktionen	28
2.3.1	Die Skalenfunktionen im thermodynamischen Limes	28
2.3.2	Die Finite-Size-Skalenfunktionen	31
2.4	Ergebnisse für $O(2)$ und $O(6)$	34
2.4.1	Resultate für die Skalenfunktionen	34
2.4.2	Der Goldstone-Effekt	35
2.4.3	Der universelle Wert der Binderkumulante	37
3	Ergebnisse der aQCD	41
3.1	Bekannte Ergebnisse der aQCD	43
3.2	Allgemeines zu den Simulationen	45
3.3	Die kritische Kopplung	47
3.3.1	Extrapolation der pseudokritischen Werte	48
3.3.2	Das Skalenverhalten auf der kritischen Isotherme	50
3.4	Der Goldstone-Effekt	54
3.4.1	Der Bereich zwischen T_d und T_c	55
3.4.2	Temperaturen unterhalb T_d	58
3.5	Kritisches Verhalten auf der Koexistenzlinie	60
3.6	Skalenfunktionen	63
3.7	Massenabhängigkeit bei $T > T_c$	68
3.8	Binderkumulante	70

INHALTSVERZEICHNIS	5
4 Zusammenfassung	73
A Gleichverteilte N-dimensionale Einheitsvektoren	79
B Tabellen der aQCD	81
Literaturverzeichnis	91

Einleitung

Unser Universum begann mit einem so genannten Urknall, bei dem sich ein extrem heißer und dichter Anfangszustand explosionsartig ausdehnte. Im Zuge dieser Ausdehnung und der damit einhergehenden Abkühlung durchlief das Universum mehrere Phasenübergänge, darunter bei einer Temperatur von etwa 10^{12} Kelvin den Deconfinement-Phasenübergang der Quantenchromodynamik (QCD), der Theorie der starken Wechselwirkung. Man nimmt heute an, dass die Materie bei Temperaturen oberhalb des Phasenübergangs vor allem aus einem dichten Plasma aus freien Quarks und Gluonen besteht, dem Quark-Gluon-Plasma (QGP). Bei Temperaturen unterhalb des Phasenübergangs hingegen sind die Quarks und Gluonen in Hadronen eingeschlossen (*confined*), zu denen auch Protonen und Neutronen gehören, die heutzutage den Großteil der bekannten Materie ausmachen.

Seit einigen Jahren wird nun in großen Teilchenbeschleunigern wie dem *Relativistic Heavy Ion Collider* (RHIC) am BNL und dem *Large Hadron Collider* (LHC) am CERN (ab 2007) versucht, mit Schwerionenstößen zumindest in einem kleinen Volumen (einige fm^3) so hohe Temperaturen zu erzeugen, dass man diesen Phasenübergang untersuchen kann. Es wurden bereits Hinweise auf einen neuen Materiezustand gefunden, aber es ist bisher noch umstritten, ob es wirklich ein QGP ist.

Eine andere Möglichkeit, diesen Phasenübergang zu untersuchen, bietet die Gittertheorie. Mit Hilfe von Computersimulationen wurden einige Eigenschaften des Phasenübergangs bestimmt. Dabei gab es ein überraschendes Ergebnis: Ein anderer Phasenübergang der QCD, der chirale Phasenübergang bei verschwindender Quarkmasse, findet bei der gleichen Temperatur wie der Deconfinement-Phasenübergang statt, obwohl a priori keine gemeinsame Ursache bekannt ist. Dadurch ergeben sich eine ganze Anzahl neuer Fragen: Welche Verbindung gibt es zwischen den beiden Phasenübergängen? Wie beeinflussen sie sich gegenseitig? Welche Phänomene werden von welchem Phasenübergang erzeugt? Wodurch wird die Ordnung des Phasenübergangs bestimmt?

Ein großes Problem bei der Beantwortung dieser Fragen besteht darin, dass man die beiden Phasenübergänge normalerweise nicht getrennt untersuchen kann. Es gibt aber ein Modell, in dem die Phasenübergänge getrennt vorkommen. Es ist die QCD mit adjungierten Fermionen (aQCD), bei der es nicht nur wie in der fundamentalen QCD drei Farbfreiheitsgraden gibt, sondern deren acht. Diese Theorie beschreibt

daher nicht die Realität, stimmt aber in den meisten Eigenschaften mit ihr überein und kann deshalb zum Studium dieser Eigenschaften benutzt werden.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, in der aQCD den kritischen Punkt für den chiralen Phasenübergang genauer zu bestimmen und den so genannten Goldstone-Effekt in der chiral gebrochenen Phase nachzuweisen. Dazu vergleichen wir das Verhalten auf der kritischen Linie mit dem der dreidimensionalen $O(N)$ -Spinmodelle und deren kritischen Exponenten. Darüber hinaus soll untersucht werden, ob der Ordnungsparameter $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ eine Skalenfunktion hat und inwieweit sie mit der eines $O(N)$ -Spinmodells übereinstimmt. Zusätzlich soll der Einfluss des Deconfinement-Phasenübergangs auf den Goldstone-Effekt untersucht werden.

Der Aufbau dieser Arbeit ist der folgende:

Das erste Kapitel gibt einen kurzen Überblick über die Unterschiede zwischen der QCD mit fundamentalen und adjungierten Fermionen, vor allem in Bezug auf die chirale Symmetrie und deren Zusammenhänge mit den Spinmodelle. Des Weiteren wird die Gitter-Diskretisierung der QCD bei endlicher Temperatur und deren Auswirkung auf die chirale Symmetrie beschrieben.

Im zweiten Kapitel werden für den späteren Vergleich mit den aQCD-Daten die Ergebnisse des $O(2)$ - und $O(6)$ -symmetrischen Spinmodells präsentiert, insbesondere universelle Größen wie kritische Exponenten, die Binderkumulante am kritische Punkt und die Skalenfunktionen im thermodynamischen Limes und für endliche Gittergrößen.

Im dritten Kapitel schließlich werden die Ergebnisse der aQCD-Simulationen analysiert. Zuerst werden die Ergebnisse einer früheren Arbeit zur aQCD [1] rekapituliert. Der nächste Abschnitt beschreibt einige technische Details der neuen Simulationen und gibt einen allgemeinen Überblick über die Daten. Im dritten Teil werden verschiedene Ansätze zur Bestimmung der kritischen Temperatur untersucht. Der vierte Teil beschäftigt sich mit dem Nachweis des Goldstone-Effekts in der chiral gebrochenen Phase und dem Einfluss des Deconfinement-Phasenübergangs auf die effektive Dimension der Theorie. Anschließend werden Extrapolationen aufgrund des Goldstone-Effekts benutzt, um das kritische Verhalten auf der Koexistenzlinie zu untersuchen. Mit allen diesen Ergebnissen kann im sechsten Abschnitt die Skalenfunktion des chiralen Kondensats und der chiralen Suszeptibilität gefunden und mit der Skalenfunktion der Spinmodelle verglichen werden. Zum Schluss wird die Massenabhängigkeit in der chiral symmetrischen Phase studiert und versucht, den universellen Wert der Binderkumulante am kritischen Punkt abzuschätzen.

In Kapitel vier wird diese Arbeit durch eine kurze Zusammenfassung der Ergebnisse abgeschlossen. In Anhang A wird die Wahrscheinlichkeitsdichte der einzelnen Komponenten von gleichverteilten N -dimensionale Einheitsvektoren berechnet, und Anhang B enthält ausführliche Tabellen mit den Simulationsergebnissen der aQCD.

Kapitel 1

QCD mit adjungierten Fermionen

In diesem Kapitel werde ich einen kurzen Überblick über die Quantenchromodynamik (QCD) auf dem Gitter geben und die Unterschiede zwischen der fundamentalen und der adjungierten Darstellung der Farb-Symmetriegruppe $SU(3)$ betrachten. Eine ausführlichere Einführung in die Gittereichtheorie kann in den Lehrbüchern [2, 3] oder verschiedenen Überblicks-Artikeln (z.B. [4]) gefunden werden.

1.1 QCD im Kontinuum

Im Kontinuum wird die QCD durch die Lagrangedichte $\mathcal{L}_{QCD}(x)$ beschrieben. Sie kann in einen gluonischen und einen fermionischen Anteil

$$\mathcal{L}_{QCD}(x) = \mathcal{L}_g(x) + \mathcal{L}_f(x), \quad (1.1)$$

$$\mathcal{L}_g(x) = -\frac{1}{4} \sum_{a=1}^8 F_{\mu\nu}^a(x) F_a^{\mu\nu}(x), \quad (1.2)$$

$$\mathcal{L}_f(x) = \sum_{f=1}^{N_f} \bar{\psi}_f^\alpha(x) (i\gamma^\mu D_\mu - m_f)_{\alpha\beta} \psi_f^\beta(x), \quad (1.3)$$

aufgespalten werden, wobei N_f die Anzahl der Quark-Flavours und $\psi_f^\alpha(x)$ und $\bar{\psi}_f^\alpha(x)$ die Quarkfelder (mit Diracindex α und Flavourindex f) bezeichnen.

Der gluonische Anteil beschreibt die Selbstwechselwirkung der Gluonen über den Feldstärketensor

$$F_{\mu\nu}^a(x) = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf_{bc}^a A_\mu^b A_\nu^c \quad (1.4)$$

wobei A_μ^a die Eichfelder (mit Farbindex a), f_{bc}^a die Strukturkonstanten der $SU(3)$ und g die Kopplungskonstante bezeichnen. Die kovariante Ableitung im fermionischen Anteil wird durch

$$D_\mu = \partial_\mu - ig \frac{\lambda_a}{2} A_\mu^a(x) \quad (1.5)$$

definiert, damit die Lagrangedichte invariant unter lokalen Eichtransformationen der $SU(3)$ ist. λ_a sind die Gell-Mann-Matrizen, die Generatoren der $SU(3)$.

1.2 Die adjungierte Darstellung der $SU(3)$

Zu der Farbsymmetriegruppe $SU(3)$ der QCD existieren, wie zu jeder Gruppe, beliebig viele Darstellungen. Zwei besondere Darstellungen sind die fundamentale und die adjungierte Darstellung. Sie sind beide irreduzibel, das heißt, es existiert kein invarianter Unterraum. Die fundamentale (oder auch definierende) Darstellung ist dreidimensional und besteht aus unitären 3×3 -Matrizen mit Determinante $+1$. Da in der QCD die Quarks genau drei Farbfreiheitsgrade besitzen, die eine Basis des Darstellungsraum bilden, wird die starke Wechselwirkung durch die fundamentale Darstellung beschrieben.

Wählt man eine andere, höherdimensionale Darstellung, zum Beispiel die achtdimensionale adjungierte Darstellung, hat man mehr Farbfreiheitsgrade, so dass man nicht mehr die Wirklichkeit beschreibt. Wie sich aber in Untersuchungen sowohl der $SU(2)$ [5, 6] als auch der $SU(3)$ [7] gezeigt hat, bieten Simulationen mit adjungierten Fermionen einen großen Vorteil bei der Erforschung der Phasenübergänge der QCD. In der QCD mit Fermionen in der fundamentalen Darstellung finden der chirale und der Deconfinement-Phasenübergang bei der gleichen Temperatur statt. Dadurch sind Effekte, die nur einen der beiden Phasenübergänge betreffen, schwierig zu bestimmen. In der QCD mit Fermionen in der adjungierten Darstellung (im Folgenden aQCD genannt) finden die Phasenübergänge jedoch bei unterschiedlichen Temperaturen statt, so dass sich ihre Eigenschaften besser analysieren lassen.

Die adjungierte Darstellung der $SU(3)$ erhält man, indem man den von den acht Generatoren λ_a der fundamentalen Darstellung aufgespannten Vektorraum betrachtet. Diese sind spurlose, hermitesche 3×3 -Matrizen und genügen der Kommutatorrelation

$$[\lambda_a, \lambda_b] = if_{abc}\lambda_c. \quad (1.6)$$

Die f_{abc} sind total antisymmetrisch und heißen Strukturkonstanten der Gruppe. Der Darstellungsraum R der adjungierten Darstellung besteht also aus spurlosen, hermiteschen 3×3 -Matrizen r , die als $r = \Phi_i \lambda_i$ geschrieben werden können. Die adjungierte Darstellung $D^{adjungiert}(U)$ ist dann definiert durch

$$D^{adjungiert}(U^{(3)}) : r \longrightarrow UrU^\dagger, \quad (1.7)$$

wobei U ein Element der $SU(3)$ -Gruppe ist. Da sich r als achtkomponentiger Vektor auffassen lässt, kann man $D^{\text{adjungiert}}(U)$ als 8×8 -Matrix $U^{(8)}$ schreiben, die durch

$$U_{ab}^{(8)} = \frac{1}{2} \text{tr} (\lambda_a U \lambda_b U^\dagger) \quad (1.8)$$

gegeben ist. Die Generatoren der adjungierten Darstellung sind

$$(T_a)_{bc} = -if_{abc}. \quad (1.9)$$

Die Matrix $U^{(8)}$ ist rein reell, wie man leicht nachrechnen kann. Dies ist eine allgemeine Eigenschaft aller adjungierten Darstellungen (siehe z.B. [8], Seite 499).

1.3 Symmetrien von QCD und aQCD

Die QCD-Lagrangedichte ist durch ihre Konstruktion invariant unter lokalen Transformationen

$$\begin{aligned} \psi(x) &\longrightarrow U(x) \psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\longrightarrow \bar{\psi}(x) U^\dagger(x) \\ A_\mu(x) &\longrightarrow U(x) A_\mu(x) U^\dagger(x) - \frac{i}{g} (\partial_\mu U(x)) U^\dagger(x) \end{aligned} \quad (1.10)$$

mit $U(x) \in SU(3)$ und $A_\mu(x) = \frac{\lambda_a}{2} A_\mu^a(x)$. Dieses gilt sowohl in der fundamentalen als auch der adjungierten Darstellung. Die Eigenschaften dieser Farbsymmetriegruppe sind verantwortlich für das Confinement der Quarks bei kleinen Energien und die asymptotische Freiheit bei hohen Energien.

Bei kleinen Energien ist die Kopplung zwischen den Quarks und Gluonen so stark, dass nur Farbsinglettzustände („farblose“ Zustände) erlaubt sind. Da einzelne Quarks jedoch eine bestimmte Farbladung tragen (rot, grün, blau oder deren Antifarben), können diese nicht einzeln existieren, sondern müssen als Quark-Antiquark-Paar (Meson) oder Dreiquarkzustand (Baryon) auftreten. Versucht man, einen solchen gebundenen Zustand in einzelne Quarks zu separieren, wird das Potential zwischen den Quarks so groß, dass sich neue Quark-Antiquark-Paare bilden. Diese bilden mit den ursprünglichen Quarks neue Mesonen oder Baryonen.

Bei hohen Energien jedoch wird die Kopplung so klein, dass die Quarks und Gluonen in einen quasifreien Zustand übergehen, das Quark-Gluon-Plasma (QGP). Zwischen den beiden Zuständen gibt es bei der Temperatur T_d einen Phasenübergang, den so genannten Deconfinement-Phasenübergang.

In der reinen Eichtheorie, also für $m_q \rightarrow \infty$, kann der Deconfinement-Phasenübergang durch die spontane Brechung der globalen $Z(3)$ -Symmetrie, der Zentrumssymmetrie der $SU(3)$, erklärt werden. Das dreidimensionale $Z(3)$ -Spinmodell besitzt

einen Phasenübergang erster Ordnung. Da Fluktuationen in Zeitrichtung in der QCD durch endliche Temperaturen abgeschnitten werden (siehe Kapitel 1.4), ist die Theorie in Bezug auf kritische Phänomene effektiv dreidimensional und sollte daher auch einen Phasenübergang erster Ordnung aufweisen.

Die QCD-Lagrangedichte besitzt für masselose Fermionen eine weitere, globale Symmetrie, die chirale Symmetrie (auch Flavour-Symmetrie genannt), die im Prinzip unabhängig von der Farbsymmetrie ist, da die Wechselwirkung zwischen Gluonen und Quarks nur von der Farbe, nicht aber vom Flavour abhängt. In diesem Fall unterscheiden sich die Symmetriegruppen in der fundamentalen und der adjungierten Darstellung.

Wählt man für die γ -Matrizen die chirale Darstellung

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

mit den Pauli-Matrizen σ_i , kann der Dirac-Spinor ψ in einen rechts- und einen linkshändigen Anteil $\psi = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix}$ zerlegt werden. Der fermionische Teil der Lagrangedichte mit diesen zweikomponentigen Feldern hat dann die Form

$$\mathcal{L}_f(x) = \sum_{f=1}^{N_f} \psi_{L,f}^\dagger i \bar{\sigma}^\mu D_\mu \psi_{L,f} + \psi_{R,f}^\dagger i \sigma^\mu D_\mu \psi_{R,f} - m_f (\psi_{L,f}^\dagger \psi_{R,f} + \psi_{R,f}^\dagger \psi_{L,f}), \quad (1.12)$$

mit $\sigma^\mu = (1, \sigma)$ und $\bar{\sigma}^\mu = (1, -\sigma)$. Die links- und rechtshändigen Felder sind also nur durch den Masseterm aneinander gekoppelt. Betrachtet man den Fall zweier masseloser Fermionen u und d , ist die Lagrangedichte invariant unter globalen Transformationen

$$\begin{aligned} \psi_L &= \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}_L \longrightarrow V_L \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}_L, \\ \psi_R &= \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}_R \longrightarrow V_R \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}_R, \end{aligned} \quad (1.13)$$

mit $V_L \in U_L(2)$, $V_R \in U_R(2)$. Für nichtverschwindende, aber gleiche Massen $m_u = m_d$ muss $V_L = V_R$ gelten, damit die Lagrangedichte invariant bleibt. Bei unterschiedlichen Massen schliesslich bleibt nur eine $U(1)$ -Invarianz übrig.

Man kann nun die rechtshändigen Felder durch Anwendung der Ladungskonjugation so umschreiben, dass sie sich unter Lorentztransformationen wie linkshändige Felder transformieren

$$\psi'_L = \sigma_2 \psi_R^*, \quad \psi'^{\dagger}_L = \psi_R^T \sigma_2. \quad (1.14)$$

Die Lagrangedichte für die rechtshändigen Fermionen ändert sich dann zu

$$\psi_R^\dagger i \sigma^\mu (\partial_\mu - ig A_\mu^a t_r^a) \psi_R = \psi'^{\dagger}_L i \bar{\sigma}^\mu (\partial_\mu - ig A_\mu^a t_{\bar{r}}^a) \psi'_L, \quad (1.15)$$

wobei t_r^a die Generatoren der Darstellung r und $t_{\bar{r}}^a$ die Generatoren der zu r konjugierten Darstellung bezeichnet.

Verwendet man also die fundamentale Darstellung der $SU(3)$, so hat man zwei linkshändige Fermionen in der 3-Darstellung (Quarks) und zwei linkshändige Fermionen in der $\bar{3}$ -Darstellung (Antiquarks). Daher ist hier die chirale Symmetrie eine $U_L(2) \otimes U_R(2)$ -Symmetrie, die auch als $SU(2)_{isospin} \otimes SU(2)_{chiral} \otimes U_V(1) \otimes U_A(1)$ aufgeschrieben wird. Die axiale $U_A(1)$ ist jedoch nur eine Symmetrie der klassischen Lagrangedichte, weil sie auf Quantenniveau durch die Adler-Bell-Jackiw-Anomalie (auch Dreiecksanomalie genannt) gebrochen wird [9, 10]. Es bleibt also in der Quantenfeldtheorie nur eine $SU(2)_{isospin} \otimes SU(2)_{chiral} \otimes U_V(1)$ übrig.

Betrachtet man aber die existierenden Hadronen und ihre Wechselwirkung, sind nur zwei dieser Symmetrien realisiert: zum einen die $U_V(1)$, die der Baryonenzahlerhaltung entspricht, zum anderen die $SU(2)_{isospin}$, die der Invarianz unter Vertauschung von *up*- und *down*-Quarks entspricht und wegen der leicht unterschiedlichen Massen der beiden Quark-Flavours nur annähernd erfüllt ist. Bei der $SU(2)_{chiral}$ -Symmetrie würde man zu jedem Teilchen ein Teilchen mit gleicher Masse und entgegengesetzter Parität erwarten. Diese existieren aber nicht. Also ist die $SU(2)_{isospin} \otimes SU(2)_{chiral} \otimes U_V(1)$ -Symmetrie unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur T_c spontan zu einer $SU(2)_{chiral} \otimes U_V(1)$ gebrochen.

Da die Gruppe $SU(2) \otimes SU(2)$ isomorph zur Gruppe $O(4)$ ist, sollte der chirale Phasenübergang ein kontinuierlicher Phasenübergang sein und in der gleichen Universalitätsklasse wie das dreidimensionale $O(4)$ -symmetrische Spinmodell liegen [13, 14].

Die spontane Brechung einer globalen kontinuierlichen Symmetrie erzeugt nach dem Goldstone-Theorem masselose Zustände, die Goldstone-Bosonen. Deren Anzahl entspricht der Differenz zwischen der Zahl der Generatoren der ungebrochenen und der gebrochenen Symmetrie [11, 12]. Durch die Brechung der $SU(2)_{chiral}$ sollte es also drei Goldstone-Bosonen geben, die Pionen. Da in Wirklichkeit die Quarks nicht masselos sind und deshalb die $SU(2)_{chiral}$ explizit gebrochen ist, haben diese zwar eine von Null verschiedene Masse, sind aber sehr viel leichter als alle anderen Hadronen und können daher annähernd als Goldstone-Bosonen bezeichnet werden.

Bei der adjungierten Darstellung erhält man eine höhere Symmetrie. Diese Darstellung ist reell, also ist $8 = \bar{8}$, so dass Teilchen und Antiteilchen auf die gleiche Art und Weise unter der $SU(3)$ transformieren. Dies hat zur Folge, dass hier die chirale Symmetrie größer ist, nämlich $U(4)$. Die $U_A(1)$ ist wiederum durch ein Anomalie gebrochen, so dass eine $SU(4)$ -Symmetrie übrig bleibt, die die $SU(2)_{isospin} \otimes SU(2)_{chiral} \otimes U_V(1)$ -Symmetrie der fundamentalen Darstellung als eine Untergruppe enthält. Diese Symmetrie wird durch das chirale Kondensat spontan zu einer $SO(4)$ -Symmetrie gebrochen [15, 16, 17]. Da die $SU(4)$ 15 und die $SO(4)$ sechs Generatoren besitzt, entstehen hierbei neun masselose Goldstone-Bosonen.

Die Gruppe $SU(4)$ ist isomorph zur Gruppe $O(6)$, deshalb sollte hier der chirale Phasenübergang in der Universalitätsklasse des dreidimensionalen $O(6)$ -symmetrischen Spinmodells liegen. Allerdings stimmt hier im Gegensatz zur QCD mit Fermionen in der fundamentalen Darstellung die Anzahl der gebrochenen Generatoren nicht überein, da beim Spinmodell die $O(6)$ -Symmetrie mit 15 Generatoren zu einer $O(5)$ -

Symmetrie mit 10 Generatoren gebrochen wird, also nur 5 Goldstone-Bosonen entstehen.

1.4 QCD bei endlicher Temperatur

Zur Untersuchung von Phasenübergängen benötigt man eine Formulierung der QCD, die auch die Temperatur enthält. Dazu startet man im allgemeinen mit der Zustandssumme. In der QCD kann man sie durch das euklidische Pfadintegral

$$Z_{QCD}(T, V) = \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \exp(-S_{QCD}^E[T, V, A, \psi, \bar{\psi}]) \quad (1.16)$$

darstellen, wobei die euklidische Wirkung $S_{QCD}^E[T, V, A, \psi, \bar{\psi}]$ durch

$$S_{QCD}^E[T, V, A, \psi, \bar{\psi}] = \int_0^{1/T} d\tau \int_V d^3x \mathcal{L}_{QCD}^E[A, \psi, \bar{\psi}]. \quad (1.17)$$

definiert ist. Die euklidische Lagrangedichte wiederum erhält, indem man in Gleichung 1.1 die Substitution $x_0 \rightarrow -ix_4$ (Wick-Rotation) durchführt und die γ -Matrizen durch die euklidischen Version γ^E ersetzt. Man erhält damit

$$\mathcal{L}_{QCD}^E(x) = \frac{1}{4} \sum_{a=1}^8 F_{\mu\nu}^a(x) F_a^{\mu\nu}(x) + \sum_{f=1}^{N_f} \bar{\psi}_f^\alpha(x) (\gamma^{\mu,E} D_\mu + m_f)_{\alpha\beta} \psi_f^\beta(x). \quad (1.18)$$

Mit Hilfe der Zustandssumme können nun Erwartungswerte von physikalischen Observablen berechnet werden:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}A \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{O} e^{-S_{QCD}^E}}{Z_{QCD}}. \quad (1.19)$$

Im folgenden wird der Index E weggelassen, da nur die euklidische Metrik benutzt wird.

1.5 QCD auf dem Gitter

Da Funktionalintegral in Gleichung (1.16) ist nicht wohldefiniert, es muss daher regularisiert werden. Die in diesem Kapitel beschriebene Gitterregularisierung wurde

1974 von K. Wilson vorgeschlagen [19]. Indem man ein vierdimensionales hyperkubisches Gitter der Größe $N_\sigma^3 \times N_\tau$ mit einem Gitterabstand a einführt, wird das Integral über das gesamte Raumzeitkontinuum $T^{-1}V$ durch eine endliche Summe ersetzt. Das Volumen des Gitters beträgt dann $V = N_\sigma a$, und die Temperatur ist durch $T = \frac{1}{N_\tau a}$ gegeben.

Dafür benötigt man allerdings eine Diskretisierung der Wirkung, die im Limes $a \rightarrow 0$ die Kontinuums-Wirkung reproduziert und die gleichen Eich-Symmetrien besitzt. Der gluonische Anteil der Wirkung ist in dieser Hinsicht unproblematisch, während sich der fermionische Anteil nur schwierig diskretisieren lässt.

1.5.1 Diskretisierung der Eichwirkung

Die Eichfelder A_μ werden auf dem Gitter durch die so genannten Link-Variablen $U_\mu(x)$ repräsentiert. Diese sind Elemente der $SU(3)$, die als Paralleltransporter zwischen den Gitterpunkten x und $x + \hat{\mu}$ definiert werden

$$U_\mu(x) = \exp \left\{ ig \int_x^{x+\hat{\mu}a} dy^\nu A_\nu(y) \right\}, \quad (1.20)$$

wobei $\hat{\mu}$ einen Einheitsvektor in Richtung μ ($\mu=1,2,3,4$) bezeichnet. Die einfachste eichinvariante Kombination der $U_\mu(x)$ ist die Plaquette

$$U_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x)U_\nu(x + \mu)U_\mu^\dagger(x + \nu)U_\nu^\dagger(x), \quad (1.21)$$

mit der die Standard Wilson-Eichwirkung definiert wird

$$S_g = \beta \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \left(1 - \frac{1}{3} \text{ReTr } U_{\mu\nu}(x) \right) \quad (1.22)$$

Dabei ist β über $\beta = 6/g^2$ mit der Kopplungskonstanten verknüpft. Für kleine a erhält man

$$S_g = \frac{a^4}{2} \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \text{Tr } F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x) + O(a^6) \quad (1.23)$$

$$\xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{1}{4} \int_0^{1/T} d\tau \int_V d^3x F_{\mu\nu}^a(x)F_a^{\mu\nu}(x) + O(a^2), \quad (1.24)$$

so dass für verschwindenden Gitterabstand die Kontinuumswirkung reproduziert wird.

1.5.2 Die naive Diskretisierung der Fermionwirkung

Die Quarkfelder werden durch grassmanwertige Fermionfelder $\psi(x)$ auf jedem Gitterpunkt x dargestellt, die periodischen Randbedingungen in Raumrichtung und antiperiodischen Randbedingungen in Zeitrichtung genügen. Die kovariante Ableitung wird durch einen symmetrischen Differenzenquotienten ersetzt, und die Fermionfelder werden durch Linkvariablen miteinander verknüpft, damit die Eichinvarianz erhalten bleibt. Damit erhält man

$$S_f^{naive} = a^4 \sum_{f=1}^{N_f} \sum_{x,y} \bar{\psi}_f^\alpha(x) M_{\alpha\beta}^f(x,y) \psi_f^\beta(y) \quad (1.25)$$

mit der Fermionmatrix

$$M_{\alpha\beta}^f = m_f \delta_{\alpha\beta} \delta(x,y) + \frac{1}{2a} \sum_{\mu} (\gamma_{\mu})_{\alpha\beta} [U_{\mu}(x) \delta(x + \hat{\mu}, y) - U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu}) \delta(x - \hat{\mu}, y)]. \quad (1.26)$$

Um den Kontinuums-Limes dieser Wirkung zu berechnen, entwickelt man sie in Potenzen des Gitterabstandes a . Für die Link-Variablen ergibt sich

$$U_{\mu}(x) = \mathbf{1} + ig a \left[A_{\mu}(xa) + \frac{1}{2} a \partial_{\mu} A_{\mu}(xa) + \frac{1}{6} a^2 \partial_{\mu}^2 A_{\mu}(xa) + O(a^3) \right] + O(g^2 a^2). \quad (1.27)$$

Setzt man diese Entwicklung in Gleichung (1.26) ein

$$\begin{aligned} S_f^{naive} &= a^4 \sum_x \sum_f \left[\sum_{\mu} (\gamma_{\mu})_{\alpha\beta} \bar{\psi}_f^{\alpha}(xa) \frac{1}{2a} \left(\psi_f^{\beta}((x + \hat{\mu})a) - \psi_f^{\beta}((x - \hat{\mu})a) \right) \right. \\ &\quad \left. + ig a \left(A_{\mu}(xa) \psi_f^{\beta}((x + \hat{\mu})a) + A_{\mu}((x - \hat{\mu})a) \psi_f^{\beta}((x - \hat{\mu})a) \right) \right] \\ &\quad + m_f \bar{\psi}_f^{\alpha}(xa) \psi_f^{\beta}(xa) \delta^{\alpha\beta} + O(a^5) \quad (1.28) \\ &\xrightarrow{a \rightarrow 0} \int dx \sum_f \left[\sum_{\mu} (\gamma_{\mu})_{\alpha\beta} \bar{\psi}_f^{\alpha}(x) (\partial_{\mu} + ig A_{\mu}(x)) \psi_f^{\beta}(x) \right] \\ &\quad + m_f \bar{\psi}_f^{\alpha}(x) \psi_f^{\beta}(x) \delta^{\alpha\beta}, \end{aligned}$$

erkennt man, dass im Limes $a \rightarrow 0$ wiederum die Kontinuumswirkung reproduziert wird.

Da diese Diskretisierung sowohl im Dirac- als auch im Flavour-Raum die gleiche Struktur wie die Kontinuumswirkung hat, hat sie auch gleiche chirale Symmetrie.

Allerdings ist der Teilchengehalt verschieden. Der freie Propagator hat im Impulsraum die Form

$$\langle \bar{\psi}_\alpha(p) \psi_\beta(q) \rangle_0 = \frac{\left(i \sum_\mu \gamma_\mu \tilde{p}_\mu - m_f \right)_{\alpha\beta}}{\sum_\mu \tilde{p}_\mu^2 + m_f^2} \delta_{pq} \quad (1.29)$$

mit $\tilde{p}_\mu \equiv \frac{1}{a} \sin(p_\mu a)$. \tilde{p}_μ hat sowohl bei $p_\mu = 0$ als auch an den Rändern der Brillouinzone bei $p_\mu = \pi/a$ eine Nullstelle, so dass der Propagator bei $m_f = 0$ nicht nur eine (wie im Kontinuum), sondern 2^d Polstellen hat. Damit beschreibt die naive Diskretisierung auf einem vierdimensionalen Gitter für $N_f = 16$ massenentartete Quark-Flavour, von denen 15 unphysikalisch sind.

Es gibt nun verschiedene Möglichkeiten, die Wirkung so zu modifizieren, dass die Anzahl der zusätzlichen Flavours reduziert wird. Solange man jedoch eine vierdimensionale, lokale Theorie behalten will, wird diese Reduktion durch eine (zumindest teilweise) Brechung der chiralen Symmetrie erkauft. Dieser Zusammenhang zwischen der Zahl der zusätzlichen Flavours und der chiralen Symmetrie wird durch das Nielsen-Ninomiya Theorem [20] beschrieben.

Die am häufigsten verwendeten Fermionwirkungen sind die Wilson-Fermionwirkung, die alle zusätzlichen Flavours eliminiert, aber auch keine chirale Symmetrie mehr besitzt, und die Kogut-Susskind Fermionwirkung, die im nächsten Kapitel ausführlicher erläutert wird.

Seit einigen Jahren gibt es Fermionwirkungen, die das Nielsen-Ninomiya Theorem durch Einführung einer zusätzlichen fünften Dimension umgehen [21, 22]. Dies führt jedoch dazu, daß die Simulationen numerisch weitaus aufwändiger werden.

1.5.3 Kogut-Susskind Fermionen

Die Idee hinter der Kogut-Susskind Fermionwirkung besteht darin, daß durch den Trick der Spin-Diagonalisierung die Zahl der Quark-Flavour von 16 auf 4 reduziert werden kann [23, 24, 25]. Dazu werden durch die lokale Transformation $\Gamma(x) = \gamma_1^{x_1} \gamma_2^{x_2} \gamma_3^{x_3} \gamma_4^{x_4}$ die Fermionfelder gemäß

$$\psi(x) \longrightarrow \Gamma(x) \psi(x) \quad \bar{\psi}(x) \longrightarrow \bar{\psi}(x) \Gamma^\dagger(x) \quad (1.30)$$

transformiert. Die Fermionwirkung lässt sich dann schreiben als

$$S_f^{KS} = a^4 \sum_{x,y,\alpha} \bar{\psi}_\alpha(x) M^{KS}(x,y) \psi_\alpha(y) \quad (1.31)$$

mit

$$M^{KS}(x,y) = m_q \delta(x,y) + \frac{1}{2a} \sum_\mu \eta_\mu(x) [U_\mu(x) \delta(x + \hat{\mu}, y) - U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu}) \delta(x - \hat{\mu}, y)] \quad (1.32)$$

Die γ -Matrizen werden also durch die Phasenfaktoren $\eta_\mu(x) = (-1)^{x_1+\dots+x_\mu-1}$ ersetzt. Diese hängen nur vom Ort ab und tragen keinen Spinorindex, so dass die Dirac-Komponenten der transformierten Fermionfelder entkoppelt sind. Man kann deshalb das vierkomponentige Diracfeld $\psi(x)$ durch ein einkomponentiges Feld $\chi(x)$ ersetzen, das nur eine der entkoppelten Dirac-Komponenten enthält, und damit die Anzahl der Flavour um den Faktor vier reduzieren.

Da die Kogut-Susskind Wirkung invariant unter Translationen um $2a$ ist, wird beim Übergang zum Kontinuum ein 2^4 Hyperkubus auf einen einzigen Punkt abgebildet. Daher kann man die 16 Felder auf den Ecken des Hyperkubus' als vier Diracfelder mit je vier Komponenten interpretieren [26]. Dazu führt man statt der alten Koordinaten x mit $x_1, x_2, x_3 \in [0, 1, \dots, N_\sigma - 1]$, $x_4 \in [0, 1, \dots, N_\tau - 1]$ neue Koordinaten y und ξ ein, wobei y mit $y_1, y_2, y_3 \in [0, 2, \dots, N_\sigma - 2]$, $y_4 \in [0, 2, \dots, N_\tau - 2]$ die Position des Ursprungs des Hyperkubus' und ξ mit $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \in [0, 1]$ die Position innerhalb des Hyperkubus' beschreibt. Mit den Definitionen

$$\chi_\xi(y) \equiv \frac{1}{4}\chi(y + \xi) \quad (1.33)$$

$$\gamma^\xi \equiv \gamma_1^{\xi_1} \gamma_2^{\xi_2} \gamma_3^{\xi_3} \gamma_4^{\xi_4} \quad (1.34)$$

können dann die Dirac- und Flavour-Komponenten eines Fermionfeldes $q(y)$ aus den χ -Feldern linear kombiniert werden

$$\begin{aligned} q_f^\alpha(y) &= \frac{1}{2} \sum_\xi (\gamma^\xi)_f^\alpha \chi_\xi(y) \\ \bar{q}_f^\alpha(y) &= \frac{1}{2} \sum_\xi \bar{\chi}_\xi(y) (\gamma^{\xi^\dagger})_f^\alpha. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Damit kann die freie Kogut-Susskind Fermionwirkung in der Form

$$S_f^{KS} = (2a)^4 \sum_y \bar{q}(y) \left\{ \sum_\mu (\gamma_\mu \otimes \mathbf{1}) \partial_\mu + a(\gamma_5 \otimes \gamma_\mu^t \gamma_5^t) \square_\mu + m_q(\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) \right\} q(y) \quad (1.36)$$

geschrieben werden, wobei die Differentialoperatoren

$$\begin{aligned} \partial_\mu q(y) &\equiv \frac{1}{4a}(q(y + 2\hat{\mu}) - q(y - 2\hat{\mu})) \\ \square_\mu q(y) &\equiv \frac{1}{4a^2}(q(y + 2\hat{\mu}) - 2q(y) + q(y - 2\hat{\mu})) \end{aligned} \quad (1.37)$$

auf dem zu Hyperkuben geblockten Gitter mit dem Gitterabstand $2a$ wirken. Das Tensorprodukt ist so definiert, dass der erste Operator auf die Dirac-Komponenten, der zweite auf die Flavour-Komponenten wirkt, also $\bar{q}(y)A \otimes Bq(y) = \bar{q}_\alpha^f A^{\alpha\beta} B_{fg} q_\beta^g$. Berücksichtigt man noch die Kopplung an die Eichfelder, kann die Definition (1.35)

folgendermaßen verallgemeinert werden

$$\begin{aligned} q_f^\alpha(y) &= \frac{1}{2} \sum_{\xi} (\gamma^\xi)_f^\alpha \tilde{U}_\xi(y) \chi_\xi(y) \\ \bar{q}_f^\alpha(y) &= \frac{1}{2} \sum_{\xi} \bar{\chi}_\xi(y) \tilde{U}_\xi(y) (\gamma^\xi)_f^\alpha, \end{aligned} \quad (1.38)$$

wobei

$$\tilde{U}_\xi(y) \equiv [U_1(y)]^{\xi_1} [U_2(y + \xi_1)]^{\xi_2} \cdot \dots \cdot [U_4(y + \xi_1 + \xi_2 + \xi_3)]^{\xi_4} \quad (1.39)$$

das Produkt der Linkvariablen innerhalb eines Hyperkubus' ist.

Setzt man nun in die Kogut-Susskind Fermionwirkung die Entwicklung (1.27) ein, so erhält man nach einiger Rechnung

$$\begin{aligned} S_f^{KS} &= \sum_{y,\mu} (2a)^4 \bar{q}(y) \left\{ m_q (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) + (\gamma_\mu \otimes \mathbf{1}) \mathbf{D}_\mu \right. \\ &\quad \left. + a (\gamma_5 \otimes \gamma_\mu^t \gamma_5^t) \mathbf{D}_\mu^2 - \frac{1}{4} i g a \sum_{\mu} T_{[\mu,\nu]} F_{\mu\nu}(y) \right\} q(y) + O(a^2) \end{aligned} \quad (1.40)$$

mit der kovarianten Ableitung

$$\mathbf{D}_\mu(y) \equiv \partial_\mu + i g A_\mu(y) \quad (1.41)$$

und dem antisymmetrischen Tensor

$$T_{[\mu,\nu]} \equiv (\gamma_\mu - \gamma_\nu) \otimes \mathbf{1} + \frac{1}{2} \gamma_5^\dagger [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \otimes [\gamma_5^* (\gamma_\mu^* + \gamma_\nu^*)]. \quad (1.42)$$

Im Limes $a \rightarrow 0$ bleiben in der Wirkung nur die ersten beiden Terme übrig, die der Kontinuumswirkung mit 4 massenentarteten Flavours entsprechen.

1.5.4 Die chirale Symmetrie der Kogut-Susskind Fermionen

Die Reduktion der Zahl der Quark-Flavours führt, wie oben gesagt, zu einer verringerten chiralen Symmetrie. Im Fall der Kogut-Susskind Fermionwirkung bleibt im masselosen Fall nur eine $U(1) \otimes U(1)$ -Symmetrie übrig, wie im folgenden gezeigt wird.

Mit Hilfe der Projektoren auf die geraden und ungeraden Gitterpunkte

$$\begin{aligned} P_e &= \frac{1}{2} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \gamma_5 \otimes \gamma_5^t) \\ P_o &= \frac{1}{2} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} - \gamma_5 \otimes \gamma_5^t) \end{aligned} \quad (1.43)$$

kann man Transformationen $U_o, U_e \in U(1)$ auf die Quark-Felder definieren:

$$\begin{aligned}
q(y) \longrightarrow q'(y) &= (U_o P_o + U_e P_e) q(y) \\
&= \frac{1}{2} [(U_e + U_o)(\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) q(y) + (U_e - U_o)(\gamma_5 \otimes \gamma_5^t) q(y)] \\
\bar{q}(y) \longrightarrow \bar{q}'(y) &= \bar{q}(y) (U_o P_o + U_e P_e) \\
&= \frac{1}{2} [\bar{q}(y)(\mathbf{1} \otimes \mathbf{1})(U_e^\dagger + U_o^\dagger) + \bar{q}(y)(\gamma_5 \otimes \gamma_5^t)(U_e^\dagger - U_o^\dagger)] \quad (1.44)
\end{aligned}$$

Die Wirkung ist nur für $U_o = U_e$ und $U_o = -U_e$ invariant unter diesen Transformationen. Im ersten Fall bleibt von den Transformationen nur der Operator $\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$, der sowohl den kinetischen als auch den Massenterm der Wirkung invariant lässt. Diese Symmetrie entspricht daher der $U_V(1)$, der Baryonenzahlerhaltung.

Im zweiten Fall reduziert sich die Transformation auf den Operator $\gamma_5 \otimes \gamma_5^t$, der nur den kinetischen, nicht aber den Massenterm invariant lässt. Da der Operator spurlos im Flavourraum ist, entspricht diese Symmetrie nicht der $U_A(1)$, kann aber als $U(1)$ -Untergruppe der $SU_A(4)$ angesehen werden [18]. Daher erhält man bei einer spontanen Brechung dieser Symmetrie ein Goldstone-Boson, das kein Flavour-Singlett ist, genau wie das Pion im Kontinuum. Dies ist der große Vorteil der Kogut-Susskind Fermionwirkung, da hier im Gegensatz zum Beispiel zur Wilson-Fermionwirkung zumindest eins der 3 Goldstone-Bosonen realisiert ist und man so die Effekte des chiralen Phasenübergangs besser untersuchen kann.

1.5.5 Die Fermionwirkung mit adjungierten Fermionen

Bei der Simulation mit Fermionen in der adjungierten Darstellung muss man beachten, dass die Fermionfelder jetzt acht Farbfreiheitsgrade besitzen. Daher müssen auch die Gluonfelder in der Fermionmatrix durch Linkvariablen in der adjungierten Darstellung beschrieben werden. Die Form der Wirkung muss nicht geändert werden, es werden nur die 3×3 -Linkvariablen U_μ durch 8×8 -Matrizen $U_\mu^{(8)}$ ersetzt, die mit Hilfe der Gleichung (1.8) aus den U_μ berechnet werden können. Die Plaquette in der Eichwirkung wird weiterhin mit den 3×3 -Linkvariablen U_μ definiert.

Die Matrizen $U_\mu^{(8)}$ sind reell, wie schon in Kapitel 1.2 erwähnt, und damit auch die adjungierte Fermionmatrix $M(U^{(8)})$ und deren Determinante. Das hat den Vorteil, dass man für die Simulation von zwei Quark-Flavours den exakten Hybrid- Φ -Algorithmus benutzen kann [27], der bei einer komplexen Darstellung nur für ganzzahlige Vielfache von vier Kogut-Susskind-Quark-Flavours geeignet ist.

Die Grundidee des Hybrid- Φ -Algorithmus' liegt darin, dass man in der Zustandssumme (1.16) die grassmanwertigen Fermionfelder direkt ausintegrieren kann. Man erhält für N_f Fermionen den Term $(\det M(U))^{N_f/4}$. Ist die Determinante komplex, kann sie als Gauss-Integral über komplexe Pseudofermionfelder Φ und Φ^* dargestellt

werden

$$\det M(U) = \int \mathcal{D}\Phi \mathcal{D}\Phi^* \exp(-\Phi^* M(U)^{-1} \Phi). \quad (1.45)$$

Da die Fermionmatrix nicht positiv definit ist, kann der Integrand nicht als Boltzmann-Faktor interpretiert werden. Deshalb betrachtet man die positive definite Matrix $M^\dagger M$, die man durch

$$|\det M(U)|^2 = \int \mathcal{D}\Phi \mathcal{D}\Phi^* \exp(-\Phi^* (M(U)^\dagger M(U))^{-1} \Phi) \quad (1.46)$$

erhält. Dadurch wird zwar die Zahl der Fermionen verdoppelt, da aber $M(U)^\dagger M(U)$ keine Elemente enthält, die gerade und ungerade Gitterpunkte miteinander verbinden, kann dies wieder rückgängig gemacht werden, indem Φ nur auf den geraden Gitterpunkten definiert wird. Die Zustandssumme hat nun die Form

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\Phi \mathcal{D}\Phi^* \exp(-S_{eff}). \quad (1.47)$$

mit der effektiven Wirkung

$$S_{eff} = S_g(U) + \Phi^* (M(U)^\dagger M(U))^{-1} \Phi \quad (1.48)$$

Mit Hilfe dieser Wirkung kann man nun durch eine Kombination von Heatbath- und Leapfrog-Updates neue Konfigurationen erzeugen. Dies funktioniert allerdings nur für $N_f = 4$ oder ganzzahlige Vielfache davon, da man nur dann ein Gaussintegral wie in Gleichung (1.45) benutzen kann.

Ist die Determinante reell, kann auch die Wurzel der Determinante als Gaussintegral Φ dargestellt werden

$$\sqrt{|\det M(U^{(8)})|} = \int \mathcal{D}\Phi \exp(-\Phi^t M(U^{(8)})^{-1} \Phi), \quad (1.49)$$

wobei Φ hier ein reelles Pseudofermionfeld ist. Das heißt, in der adjungierten Darstellung können auch mit dem Hybrid- Φ -Algorithmus zwei Flavours simuliert werden, man muss nicht den Hybrid-R-Algorithmus benutzen. Ähnlich wie oben wird für den Algorithmus $M(U^{(8)})^t M(U^{(8)})$ benötigt, um die Wirkung als Wahrscheinlichkeitsmaß zu betrachten. Die effektive Pseudofermionwirkung ist dann durch

$$S_{eff} = S_g(U) + \Phi^t (M(U^{(8)})^t M(U^{(8)}))^{-1} \Phi \quad (1.50)$$

mit reellen achtkomponentigen Feldern Φ gegeben.

Zusätzlich muss für die Simulation von adjungierten Fermionen die Bewegungsgleichungen der zu den Eichfeldern kanonisch konjugierten Impulse für den Leapfrog-Update neu berechnet werden. Dazu sei hier auf die Doktorarbeit von Martin Lütgemeier verwiesen [1], in der dieses ausführlich hergeleitet wird.

1.6 Observablen

Der Ordnungsparameter für die Brechung der chiralen Symmetrie ist das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle = \langle \bar{\psi}_L\psi_R + \bar{\psi}_R\psi_L \rangle$. Wenn das chirale Kondensat ungleich Null ist, also für $T < T_c$, entstehen aus dem Vakuum virtuelle Quark-Antiquark-Paare, die die chirale Symmetrie brechen und den Quarks eine effektive Masse verleihen. Für $T \geq T_c$ verschwindet es im Limes $m_q \rightarrow 0$, da hier die chirale Symmetrie restauriert ist.

Es ist definiert als Ableitung des Logarithmus der Zustandssumme nach der Masse

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}\psi \rangle &= \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \frac{\partial \ln Z}{\partial m_q a} \\ &= \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \frac{N_f}{2} \langle \text{Tr} M^{-1} \rangle. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Der Normierungsfaktor $\frac{N_f}{2}$ berücksichtigt die Tatsache, dass jedes Fermion auf dem Gitter zu zwei Fermionen im Kontinuum wird.

Die chirale Suszeptibilität χ_m wird als Ableitung des chiralen Kondensats nach der Masse definiert

$$\begin{aligned} \chi_m &= \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial (m_q a)^2} \\ &= \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \left(\frac{N_f}{2} \right)^2 \left(\langle (\text{Tr} M^{-1})^2 \rangle - \langle \text{Tr} M^{-1} \rangle^2 \right) \\ &\quad - \frac{N_f}{2} \sum_x \langle M^{-1}(x, 0) M^{-1}(0, x) \rangle. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Der erste, nichtzusammenhängende („disconnected“) Term χ_{dis} misst die Fluktuationen des chiralen Kondensats und hat daher ein Maximum am pseudokritischen Punkt. Der zweite, zusammenhängende („connected“) Term χ_{conn} hat keinen Einfluss auf das kritische Verhalten und wird deshalb bei der Berechnung der Suszeptibilität weggelassen.

Eine weitere interessante Größe ist die Binderkumulante

$$g_r^{QCD} = \frac{\langle (\text{Tr} M^{-1})^4 \rangle}{\langle (\text{Tr} M^{-1})^2 \rangle^2}, \quad (1.53)$$

die am kritischen Punkt einen von der Gittergröße unabhängigen universellen Wert besitzt.

Der Ordnungsparameter für den Deconfinement-Phasenübergang ist in der reinen Eichtheorie der Polyakov-Loop

$$L_3 = \frac{1}{N_\sigma^3} \left\langle \left| \sum_{\vec{x}} L_3(\vec{x}) \right| \right\rangle = \frac{1}{3N_\sigma^3} \left\langle \left| \sum_{\vec{x}} \text{Tr} \prod_{x_4=1}^{N_\tau} U_4(x_4, \vec{x}) \right| \right\rangle. \quad (1.54)$$

$L_3(\vec{x})$ ist unter $Z(3)$ -Transformationen $U_4(x) \rightarrow zU_4(x)$ mit $z \in Z(3)$ nicht invariant, sondern transformiert wie

$$L_3(\vec{x}) \longrightarrow z' L_3(\vec{x}). \quad (1.55)$$

In der $Z(3)$ -symmetrischen Confinement-Phase ($T < T_d$) haben Konfigurationen, die sich nur durch eine $Z(3)$ -Transformation unterscheiden, die gleiche Wahrscheinlichkeit, so dass der Polyakov-Loop für $V \rightarrow \infty$ verschwindet. In der Deconfinement-Phase ($T > T_d$) ist die $Z(3)$ -Symmetrie gebrochen und damit der Polyakov-Loop von Null verschieden.

Durch die Einführung von dynamischen Fermionen in der fundamentalen Darstellung wird die $Z(3)$ -Symmetrie explizit gebrochen, da die Fermionwirkung nicht invariant unter $Z(3)$ -Transformationen ist. Der Polyakov-Loop ist also kein echter Ordnungsparameter mehr, zeigt aber trotzdem den kritischen Punkt durch einen starken Anstieg an.

Durch Fermionen in der adjungierten Darstellung hingegen wird die $Z(3)$ -Symmetrie nicht gebrochen, da hier die $SU(3)$ -Linkvariablen wegen Gleichung (1.8) immer in Paaren U, U^\dagger in der Fermionwirkung auftreten und die Elemente der $Z(3)$ sowohl mit den Linkvariablen als auch den λ -Matrizen kommutieren. Der Polyakov-Loop ist also mit dynamischen, adjungierten Fermionen ein exakter Ordnungsparameter. Auch für den Polyakov-Loop definiert man eine Suszeptibilität

$$\chi_L = N_\sigma^3 \left(\left\langle \left| \frac{1}{N_\sigma^3} \sum_{\vec{x}} L_3(\vec{x}) \right|^2 \right\rangle - L_3^2 \right). \quad (1.56)$$

Im nächsten Kapitel wird für die Spinmodelle eine Größe mit der gleichen Bezeichnung definiert (die longitudinale Suszeptibilität), die jedoch in keinem Zusammenhang mit der Suszeptibilität des Polyakov-Loops steht.

Kapitel 2

Die $O(N)$ -Spinmodelle

Die dreidimensionalen $O(N)$ -symmetrischen Spinmodelle spielen eine wichtige Rolle bei der Untersuchung des chiralen Phasenübergangs der QCD, da sie in der gleichen Universalitätsklasse wie adjungierte Fermionen im Kontinuum (für $N = 6$) beziehungsweise Kogut-Susskind-Fermionen auf dem Gitter (für $N = 2$) liegen sollen. Wenn man diese Beziehungen nachweisen kann, kann man vom kritischen Verhalten der Spinmodelle auf das kritische Verhalten der QCD beim chiralen Phasenübergang schließen. Der große Vorteil liegt darin, dass Simulationen von Spinmodellen einfacher und schneller sind und der kritische Punkt selbst untersucht werden kann, während QCD-Simulationen derzeit nur bei relativ großen Massen möglich sind. Mit den Erkenntnissen von den Spinmodellen kann man diese Resultate zu kleinen Massen extrapolieren.

2.1 Wirkung und Observablen

Die Zustandssumme hat bei $O(N)$ -Spinmodellen auf einem kubischen Gitter mit dem Volumen $V = L^d$ (d =Dimension) die Form

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}, \quad (2.1)$$

wobei $\beta = \frac{1}{kT}$ und $\mathcal{H}(\sigma)$ die Wirkung ist, die das betrachtete System beschreibt. T ist die Temperatur des Systems, k ist die Boltzmannkonstante, und summiert wird über alle möglichen Zustände σ des Systems. Die Wirkung ist definiert durch

$$\beta\mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \mathbf{H} \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (2.2)$$

Hierbei bezeichnet \mathbf{S}_i einen N -dimensionalen Einheitsvektor, im folgenden Spin genannt, der den Gitterplatz i einnimmt. $\langle i, j \rangle$ bedeutet, dass nur über jeweils benachbarte Spins summiert wird. J ist die Kopplung der Spins untereinander und verhält sich proportional zur inversen Temperatur. Je größer J ist, das heißt je kleiner die Temperatur, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass zwei benachbarte Spins gleich ausgerichtet sind. Dieses führt dazu, dass unterhalb einer bestimmten, kritischen Temperatur T_c die ursprüngliche $O(N)$ -Symmetrie spontan gebrochen wird. \mathbf{H} ist ein äußeres magnetisches Feld, das die ursprüngliche Symmetrie explizit bricht, d.h. für $H = |\mathbf{H}| \neq 0$ sind die Spins vorzugsweise in Richtung von \mathbf{H} ausgerichtet. Das magnetische Feld spielt also bei den Spinmodellen die gleiche Rolle wie die Quarkmasse $m_q a$ in der QCD.

Mit der Zustandssumme definiert man die so genannte freie Energiedichte des Systems

$$f(T, H, V) \equiv -\frac{\beta F}{V} = -\frac{1}{V} \ln Z. \quad (2.3)$$

Da durch das äußere Feld \mathbf{H} eine Richtung ausgezeichnet ist, bietet es sich an, den Spinvektor in eine parallele und eine senkrechte Komponente zu \mathbf{H} aufzuspalten

$$\mathbf{S}_i = S_i^{\parallel} \hat{\mathbf{H}} + \mathbf{S}_i^{\perp}. \quad (2.4)$$

Der Ordnungsparameter des Systems ist die longitudinale Magnetisierung M

$$M = \left\langle \frac{1}{V} \sum_i S_i^{\parallel} \right\rangle \equiv \langle S^{\parallel} \rangle. \quad (2.5)$$

Die eckigen Klammern symbolisieren den folgendermaßen definierten Erwartungswert (für eine beliebige Observable O)

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\sigma} O(\sigma) e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}}{\sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}}. \quad (2.6)$$

Die Ableitung von M nach H ergibt die longitudinale Suszeptibilität χ_L

$$\chi_L = \frac{\partial M}{\partial H} = V \left(\langle S^{\parallel 2} \rangle - M^2 \right). \quad (2.7)$$

Die zugehörige Binderkumulante ist definiert durch

$$g_r = \frac{\langle S^{\parallel 4} \rangle}{\langle S^{\parallel 2} \rangle^2} \quad (2.8)$$

Die Definitionen des Ordnungsparameters und seiner Ableitungen sind auf dem Gitter nur für $H \neq 0$ sinnvoll. Bei $H = 0$ gibt es keine Vorzugsrichtung mehr, und der Erwartungswert des Gittermittels über alle Spins

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \left\langle \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{S}_i \right\rangle \quad (2.9)$$

ist auf einem endlichen Gitter immer Null, da alle Konfigurationen, die sich nur um eine globale Drehung aller Spins unterscheiden, mit der gleichen Wahrscheinlichkeit auftreten. Statt dessen benutzt man

$$M_0 = \langle |\mathbf{S}| \rangle, \quad (2.10)$$

da diese Größe die gleichen kritischen Eigenschaften wie der Ordnungsparameter hat [28]. Die Definitionen der Suszeptibilität und der Binderkumulante

$$\chi_{L,0} = V (\langle \mathbf{S}^2 \rangle - M_0^2), \quad (2.11)$$

$$g_{r,0} = \frac{\langle \mathbf{S}^4 \rangle}{\langle \mathbf{S}^2 \rangle^2} \quad (2.12)$$

ändern sich entsprechend.

2.2 Kritisches Verhalten

Bei kontinuierlichen Phasenübergängen hat es sich in vielen Experimenten gezeigt, dass das Verhalten der thermodynamischen Größen in der Nähe des kritischen Punktes durch einfache Potenzgesetze beschrieben werden kann. Die Exponenten dieser Potenzgesetze werden als kritische Exponenten bezeichnet. Für das $O(N)$ -Modell mit der kritischen Temperatur T_c gelten im thermodynamischen Limes ($V \rightarrow \infty$) folgende Gesetze:

Die Magnetisierung M verhält sich bei $H \rightarrow 0$ und $T < T_c$ wie

$$\lim_{H \rightarrow 0} M = B(T_c - T)^\beta. \quad (2.13)$$

Die Suszeptibilität χ_L divergiert gemäß

$$\chi_L = C^+ |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (2.14)$$

Die longitudinale und die transversale Korrelationslänge ξ_L und ξ_T sind ein Maß für die Ausdehnung lokaler Fluktuationen. Für $H = 0$ und $t > 0$ stimmen beide überein ($\xi_L = \xi_T = \xi$), und sie divergieren ebenfalls

$$\xi = \xi^+ |T - T_c|^{-\nu}. \quad (2.15)$$

Bei $T = T_c$ und kleinen $H > 0$ gelten folgende Gesetze

$$M = d_c H^{\frac{1}{\delta}}, \quad (2.16)$$

$$\chi_L = C^c H^{-\gamma_c}, \quad (2.17)$$

$$\xi_{L,T} = \xi_{L,T}^c H^{-\nu_c}, \quad (2.18)$$

Die kritischen Exponenten sind jedoch nicht alle unabhängig, sondern über die Skalenrelationen

$$\begin{aligned} d\nu &= 2\beta + \gamma, \\ \gamma &= \beta(\delta - 1) \\ \gamma_c &= 1 - 1/\delta, \\ \nu_c &= \nu/\beta\delta \end{aligned} \tag{2.19}$$

miteinander verknüpft, wobei d die Dimension bezeichnet. Man braucht also nur zwei kritische Exponenten zu bestimmen, die anderen sind dann durch die Skalenrelationen festgelegt.

Zusätzlich sollte bei $O(N)$ -Modellen für $2 < d \leq 4$ auf der Koexistenzlinie, das heißt für $T < T_c$ und $H = 0$, eine Singularität in der Suszeptibilität auftreten. [29, 31, 30] In drei Dimensionen divergiert die Suszeptibilität für kleine H wie

$$\chi_L(T < T_c) \sim H^{-1/2}. \tag{2.20}$$

Für den Ordnungsparameter M folgt daraus das Verhalten

$$M(T < T_c) = M(T < T_c, H = 0) + c_1 H^{1/2}. \tag{2.21}$$

Dieser so genannte Goldstone-Effekt wird durch masselose Goldstone-Moden erzeugt, die sich bei Spinmodellen in Form von so genannten Spinwellen manifestieren. Spinwellen sind Konfigurationen, bei denen sich benachbarte Spins nur gering in ihrer Ausrichtung unterscheiden, so dass die Energie dieser Konfigurationen nur wenig höher als der Grundzustand ist.

2.3 Skalenfunktionen

2.3.1 Die Skalenfunktionen im thermodynamischen Limes

Um zu überprüfen, ob verschiedene Modelle in der gleichen Universalitätsklasse liegen, muss man universelle Größen vergleichen. Mit Hilfe der Renormierungsgruppentheorie kann man zeigen, dass es neben den kritischen Exponenten und bestimmten Amplitudenverhältnissen auch universelle Skalenfunktionen gibt (siehe zum Beispiel [32]). Für die Magnetisierung hat die Skalenfunktion im thermodynamischen Limes die Form

$$Mh^{-1/\delta} = f_G(z), \tag{2.22}$$

mit $z = t/h^{-1/\beta\delta}$, der reduzierten Temperatur $t = (T - T_c)/T_0$ und dem reduzierten magnetischen Feld $h = H/H_0$. Die Normierungskonstanten T_0 und H_0 werden durch die Bedingungen

$$\begin{aligned} M(t = 0, h) &= h^{1/\delta}, \\ M(t < 0, H \rightarrow 0^+) &= (-t)^\beta \end{aligned} \quad (2.23)$$

beziehungsweise

$$H_0 = d_c^{-\delta}, \quad T_0 = B^{-1/\beta} \quad (2.24)$$

festgelegt.

Äquivalent kann diese Skalenfunktion auch in der Widom-Griffiths-Form der Zustandsgleichung [33]

$$y = f(x), \quad (2.25)$$

aufgeschrieben werden, mit

$$y \equiv h/M^\delta = f_G^{-\delta}, \quad x \equiv t/M^{1/\beta} = z f_G^{-1/\beta}. \quad (2.26)$$

Die Normierungsbedingungen haben dann die Form

$$f(0) = 1, \quad f(-1) = 0. \quad (2.27)$$

Die Zustandsgleichung $f(x)$ wurde von Brézin et al. [34] mit Hilfe der ϵ -Entwicklung ($\epsilon = 4 - d$) bis zur Ordnung ϵ^2 berechnet. Im Limes $x \rightarrow -1$, also für $T < T_c$ nahe der Koexistenzlinie, kann man diese Näherung invertieren und erhält die Entwicklung [30]

$$x_s(y) + 1 = (\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3)y + \tilde{c}_2 y^{1/2} + \tilde{d}_2 y^{3/2} + \dots \quad (2.28)$$

Im Limes $x \rightarrow \infty$ hingegen, also für $T > T_c$ und kleine H , muss $f(x)$ aufgrund der Analytizitätsbedingungen an die Zustandsgleichungen, die Griffiths 1967 aufstellte [33], als konvergente Potenzreihe darstellbar sein

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^{\gamma - 2(n-1)\beta}. \quad (2.29)$$

Invertiert man diese Potenzreihe, um wiederum x als Funktion von y zu bekommen, erhält man den Ansatz

$$x_l(y) = ay^{1/\gamma} + by^{(1-2\beta)/\gamma} + \dots \quad (2.30)$$

Mit diesen beiden Funktionen kann die gesamte Zustandsgleichung parametrisiert werden, wobei der Übergangsbereich durch eine Interpolation der beiden Funktionen x_s und x_l

$$x(y) = x_s(y) \frac{y_0^p}{y_0^p + y^p} + x_l(y) \frac{y^p}{y_0^p + y^p} \quad (2.31)$$

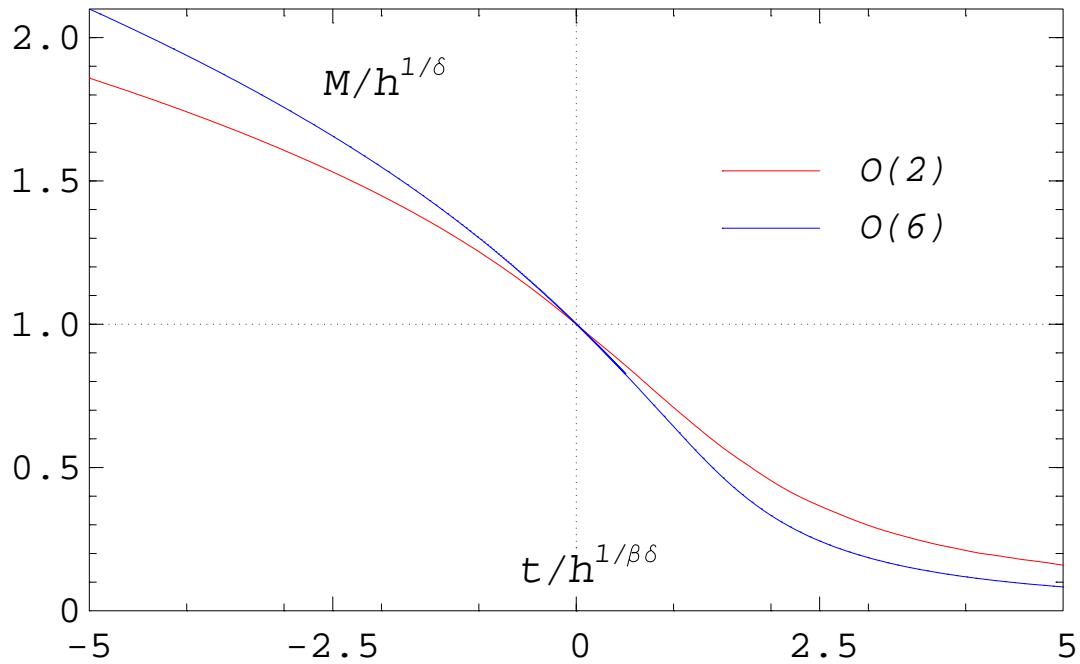


Abbildung 2.1: Die Skalenfunktionen $f_G = M/h^{1/\delta}$ für das $O(2)$ - [35] und das $O(6)$ -Modell [38].

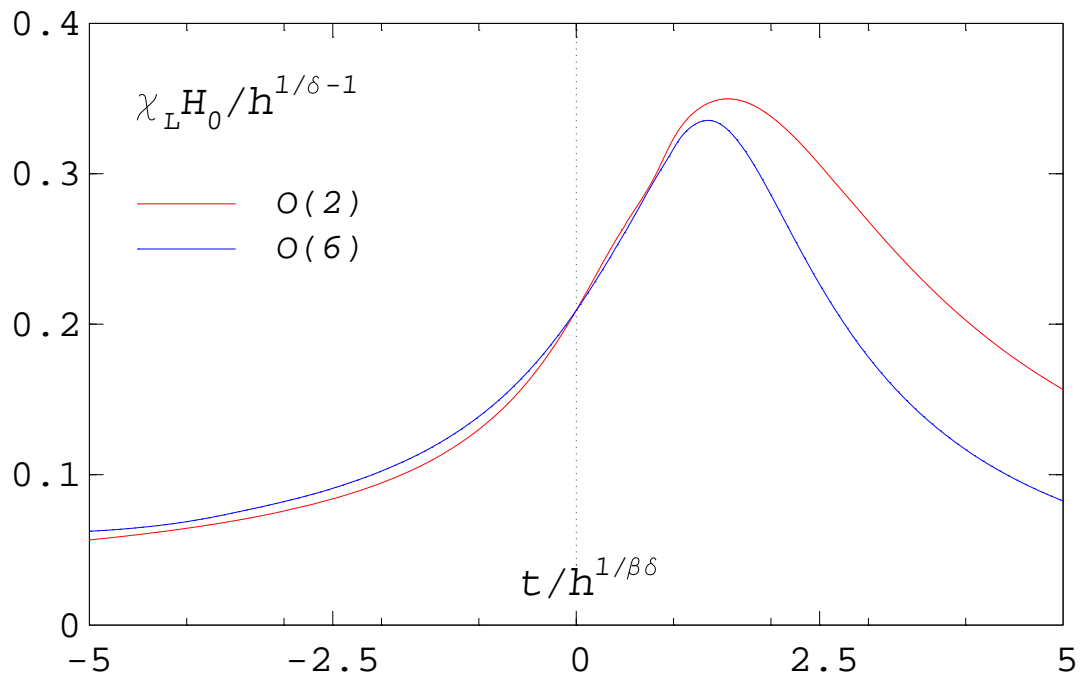


Abbildung 2.2: Die Skalenfunktionen $f_\chi = \chi_L H_0 / h^{1/\delta - 1}$ für das $O(2)$ - [36] und das $O(6)$ -Modell [38].

beschrieben werden kann.

Ebenso kann man eine Skalenfunktion für die Suszeptibilität berechnen, indem man Gleichung (2.22) nach H ableitet

$$\chi_L = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{h^{1/\delta-1}}{H_0} f_\chi(z), \quad (2.32)$$

wobei $f_\chi(z)$ direkt aus $f_G(z)$ berechnet werden kann

$$f_\chi(z) = \frac{1}{\delta} \left(f_G(z) - \frac{z}{\beta} \frac{\partial f_G}{\partial z}(z) \right). \quad (2.33)$$

2.3.2 Die Finite-Size-Skalenfunktionen

Alle bisherigen Formeln gelten nur im Grenzfall unendlichen Volumens. Die bei Computersimulationen verwendeten Gitter sind aber endlich. Das kritische Verhalten tritt daher nur näherungsweise auf, da Größen wie die Korrelationslänge oder die Suszeptibilität nicht divergieren können. Dieses gilt insbesondere für die QCD, wo nur sehr kleine Gitter betrachtet werden können, so dass ein Vergleich der obigen universellen Größen nicht immer angebracht ist.

Man kann aber wiederum mit Hilfe der Renormierungsgruppentheorie die Volumenabhängigkeit des System beschreiben (*Finite Size Scaling*) und damit universelle Finite-Size-Skalenfunktionen definieren [32]. Dazu betrachtet man L als eine weitere, relevante Skalenvariable ähnlich wie t und h . Die Finite-Size-Skalenfunktion für die Magnetisierung lautet dann

$$M(t, H, L) = L^{-\beta/\nu} \Phi(tL^{1/\nu}, HL^{1/\nu_c}, L^{-\omega}), \quad (2.34)$$

wobei hier noch nichtuniverselle Korrekturen zum Skalenverhalten (*Corrections to scaling*) in der Form von Beiträgen einer irrelevanten Skalenvariablen proportional zu $L^{-\omega}$ berücksichtigt sind. Durch die Entwicklung von Q_m nach $L^{-\omega}$ erhält man als führenden Term eine universelle Skalenfunktion

$$M(t, H, L) = \Phi_0(tL^{1/\nu}, HL^{1/\nu_c}) + \dots \quad (2.35)$$

Um die doppelte Abhängigkeit von t und h zu umgehen, betrachtet Kombinationen der beiden Variablen mit festem Wert von z . Dann kann man diese Formel so umschreiben, dass sie nur von H abhängt

$$M(z, H, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} Q_z(z, HL^{1/\nu_c}). \quad (2.36)$$

Für $L \rightarrow \infty$ nähert sich Q_z asymptotisch der Funktion

$$Q_{z,\infty} = f_G(z)(hL^{1/\nu_c})^{1/\delta} \quad (2.37)$$

an.

Beispiele für Linien mit konstantem z sind die kritische Isotherme $z = 0$ und die pseudokritische Linie $z = z_p$, die durch die Maxima der Suszeptibilität in der (t, h) -Ebene im thermodynamischen Limes definiert ist.

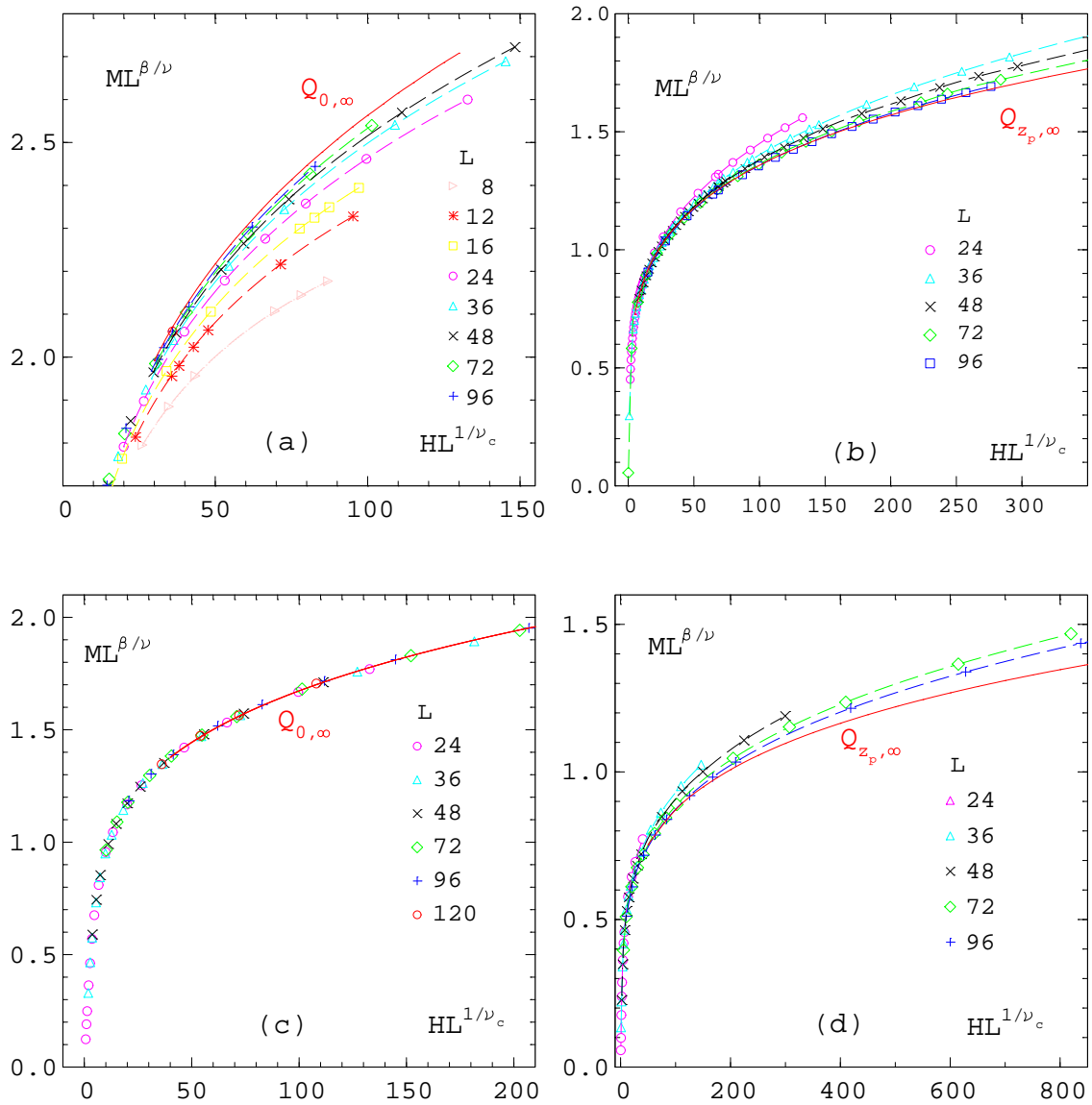


Abbildung 2.3: Finite-Size-Skalenfunktionen der Magnetisierung für das $O(2)$ -Modell auf der kritischen Isotherme ($z = 0$, Abbildung (a)) und auf der pseudo-kritischen Linie ($z = z_p$, Abbildung (b)). Die Abbildungen (c) und (d) zeigen die entsprechenden Funktionen für das $O(6)$ -Modell. Die durchgezogene rote Linie stellt die jeweilige asymptotische Funktion $Q_{z,\infty}$ aus Gleichung (2.37) dar. Die Symbole beschreiben verschiedene Gittergrößen L .

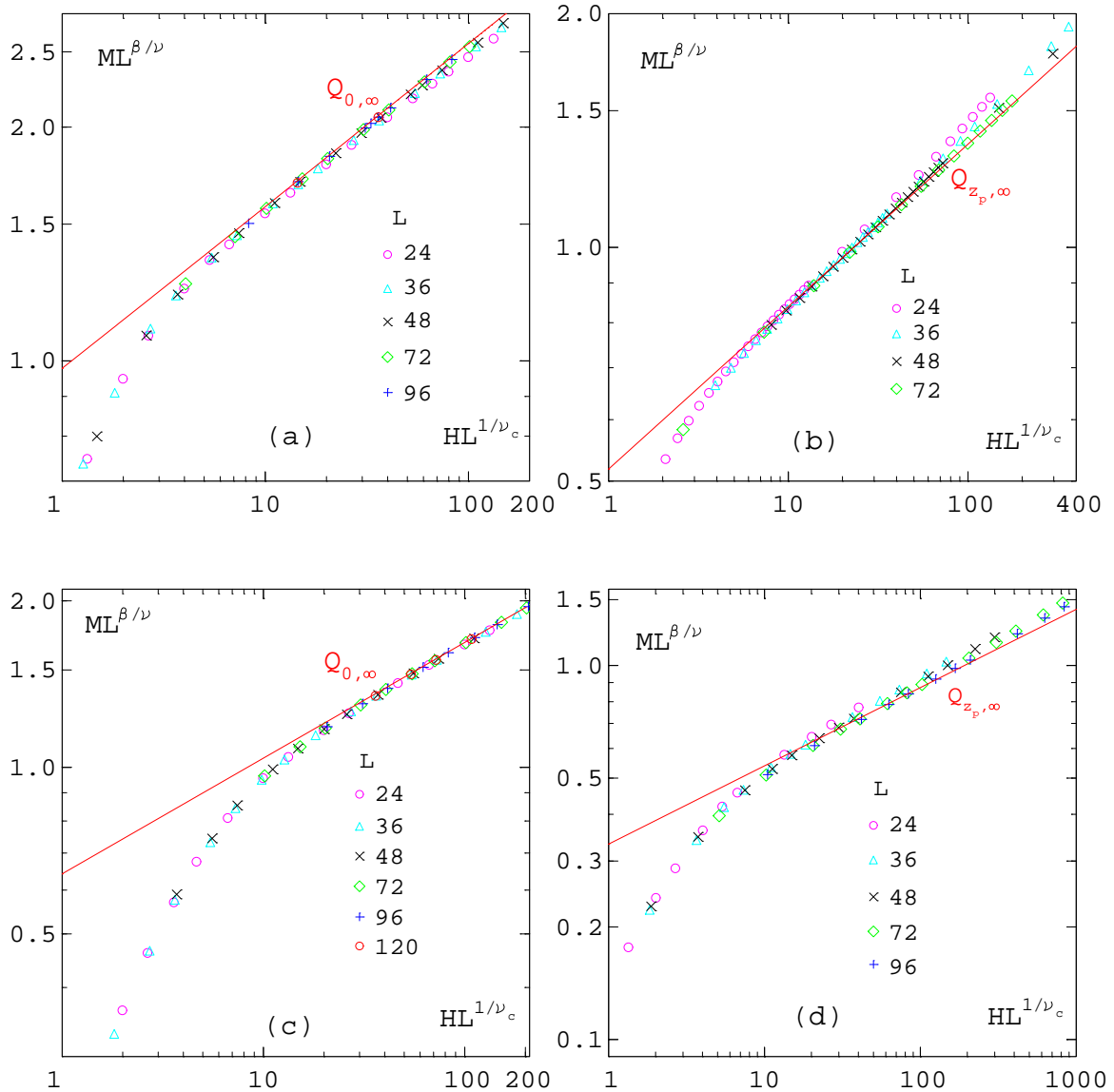


Abbildung 2.4: Die Finite-Size-Skalenfunktionen der Magnetisierung aus Abbildung 2.3 in doppelt-logarithmischer Darstellung. Die Reihenfolge der Bilder und die Bezeichnungen entsprechen Abbildung 2.3. Hier erkennt man gut die Annäherung an die asymptotische Funktion $Q_{z, \infty}$.

β	δ	γ	ν	ν_c	J_c	T_0	H_0	
0.349	4.7798	1.3192	0.6724	0.4031	0.454165	1.18	1.11	$O(2)$
0.425	4.78	1.604	0.818	0.4031	1.42865	0.626	8.32	$O(6)$

Tabelle 2.1: Kritische Exponenten, kritische Kopplung $J_c = 1/T_c$ und Normierungskonstanten für das $O(6)$ -Modell [38] und das $O(2)$ -Modell [35].

2.4 Ergebnisse für $O(2)$ und $O(6)$

Die für den Vergleich mit der QCD interessanten Spinmodelle wurden in der Vergangenheit im Hinblick auf den Goldstone-Effekt und Skalenfunktionen ausgiebig untersucht, zum Beispiel mit Gittersimulationen in [35, 36] für das $O(2)$ -Modell, in [36, 37] für das $O(4)$ -Modell und in [38] für das $O(6)$ -Modell. An dieser Stelle sollen die Ergebnisse der für die aQCD interessanten Modelle $O(2)$ und $O(6)$ kurz zusammengefasst werden.

2.4.1 Resultate für die Skalenfunktionen

Die kritischen Exponenten, die kritische Kopplung und die Normierungskonstanten, die für die weiteren Berechnungen benutzt werden, sind in Tabelle 2.1 aufgelistet. Die Fitergebnisse des $O(2)$ -Modells für die Zustandsgleichung gemäß den Gleichungen (2.28) und (2.30) und die Parameter der Interpolation (2.31) zeigt Tabelle 2.2. Der Parameter \tilde{d}_2 ist durch die Normierungsbedingung $y(0) = 1$ festgelegt, das heißt, er wird über $\tilde{d}_2 = 1 - (\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3 + \tilde{c}_2)$ berechnet.

Die entsprechenden Ergebnisse des $O(6)$ -Modells sind in Tabelle 2.3 aufgeführt. Hierbei wird für den Fit bei großen x die Gleichung (2.29) bis $n = 3$ benutzt, da der

$\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3$	\tilde{c}_2	\tilde{d}_2	a	b	y_0	p	z_p
0.352(30)	0.592(10)	0.056	1.260(3)	-1.163(20)	3.5	6	1.56(10)

Tabelle 2.2: Ergebnisse der Fits für die Skalenfunktionen des $O(2)$ -Modells [35].

$\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3$	\tilde{c}_2	\tilde{d}_2	a_1	a_2	a_3	z_p
0.36(5)	0.69(3)	-0.05	0.92(1)	1.17(2)	0.91(3)	1.34(5)

Tabelle 2.3: Ergebnisse der Fits für die Skalenfunktionen des $O(6)$ -Modells [38].

Fit mit der inversen Funktion zu instabil ist. Es gibt hier auch keine Interpolation der Form (2.31), da zwischen $z = 0.5$ und $z = 0.8$ keine verlässliche Interpolation vorliegt. Statt dessen werden die beiden Parametrisierungen in der Skalenfunktion f_G durch einen Spline verbunden.

Abbildung 2.1 zeigt die beiden resultierenden Skalenfunktionen f_G im Vergleich. Man erkennt, dass die Form sehr ähnlich ist, die $O(6)$ -Skalenfunktion aber etwas steiler verläuft. Abbildung 2.2 zeigt die Skalenfunktionen f_χ . Für $z \lesssim 1$ liegen sie nahezu aufeinander, streben dann aber auseinander, so dass die $O(2)$ -Skalenfunktion ihr Maximum bei größerem Wert von z als die $O(6)$ -Skalenfunktion hat. Aus der Position des Maximums von f_χ kann man den universellen Wert z_p der pseudokritischen Linie ablesen. Dieser Wert ist in den Tabellen 2.2 und 2.3 angegeben.

Die Abbildungen 2.3 (a)-(d) zeigen die Finite-Size-Skalenfunktionen der Magnetisierung für $O(2)$ und $O(6)$ sowohl auf der kritischen Isotherme als auch auf der pseudokritischen Linie. Abbildung (b) zeigt Daten für $z_p = 1.67$, also bei einem etwas höheren Wert als dem aus der Skalenfunktion der Suszeptibilität bestimmten. Trotzdem sollte diese Abweichung nur einen geringen Einfluss auf die Skalenfunktion haben. Die Abbildungen 2.4 (a)-(d) zeigen dieselben Daten in einer doppelt-logarithmischen Darstellung.

Außer bei (c) sind für große HL^{1/ν_c} Einflüsse von Skalenkorrekturen zu erkennen. Trotzdem zeigen die doppelt-logarithmischen Bilder, dass die Daten im thermodynamischen Limes schon für kleine HL^{1/ν_c} gut durch die asymptotische Funktion $Q_{z,\infty}$ beschrieben werden können.

2.4.2 Der Goldstone-Effekt

Die Abbildungen 2.5 und 2.6 zeigen den Goldstone-Effekt in der gebrochenen Phase für die Magnetisierung sowohl bei $O(2)$ als auch bei $O(6)$. Die gestrichelten Linien stellen Fits dar mit dem Ansatz

$$M(T < T_c) = M(T < T_c, H = 0) + c_1 H^{1/2} + c_2 H. \quad (2.38)$$

Der Term $c_1 H$ ist der nächsthöhere Term der ϵ -Entwicklung. Diesen zusätzlichen Term benötigt man, da nahe der kritischen Temperatur das führende Verhalten nur bei sehr kleinen Werten von H zu sehen ist. Je weiter man sich von der kritischen Temperatur entfernt, desto größer wird der Bereich in H , in dem der führende Term ausreicht. Es zeigt sich, dass die Finite-Size-Effekte wie erwartet stark zunehmen, wenn man sich der Koexistenzlinie annähert.

Mit Hilfe des obigen Ansatzes kann man die Daten bei endlichem äußerem Feld zu verschwindendem Feld extrapolieren. Dieses wird vor allem bei der Analyse der aQCD-Daten nützlich sein, da man dort nicht bei verschwindender Masse (die dem äußeren Feld entspricht) simulieren kann. Aber auch bei Spinmodellen hat es Vorteile, da man in Gittersimulationen bei verschwindendem Feld nicht den echten

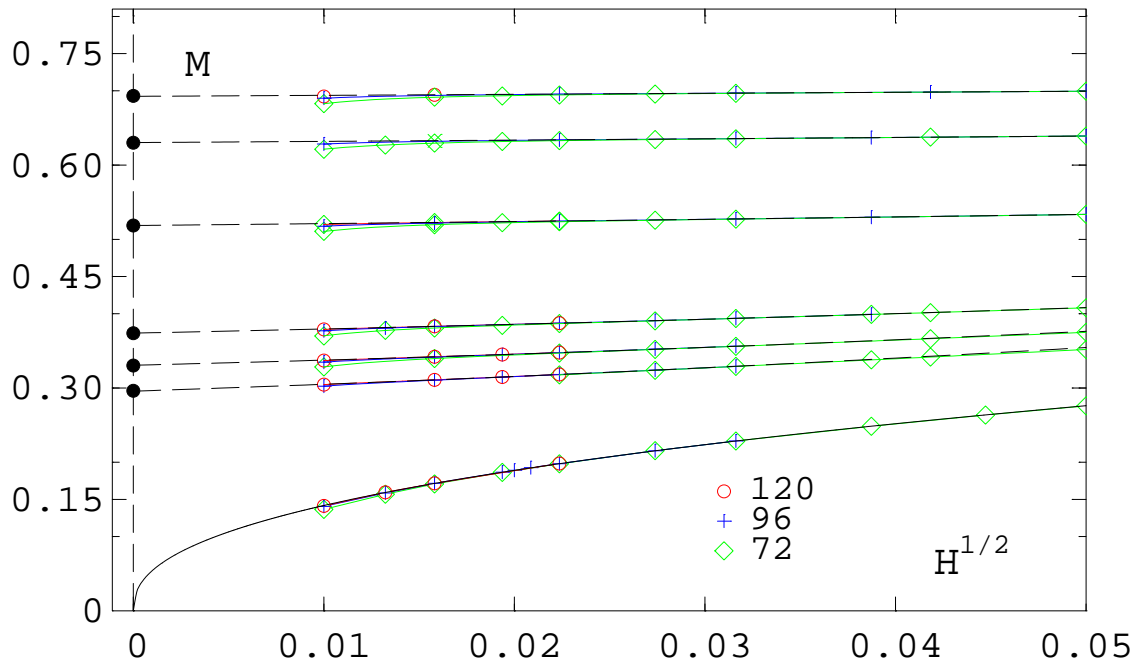


Abbildung 2.5: Die Magnetisierung M des $O(2)$ -Modells bei sechs verschiedenen Temperaturen in der gebrochenen Phase $T < T_c$ und auf der kritischen Isotherme $T = T_c$ (unterste Werte). Hier sind nur die Gitter berücksichtigt, die dem thermodynamischen Limes entsprechen. Die gestrichelten Linien repräsentieren Fits mit dem Ansatz 2.38. Die durchgezogene schwarze Linie ist ein Fit mit dem Ansatz $M(T = T_c, H) = d_c H^{1/\delta} (1 + d_c^1 H^{\omega\nu_c})$.

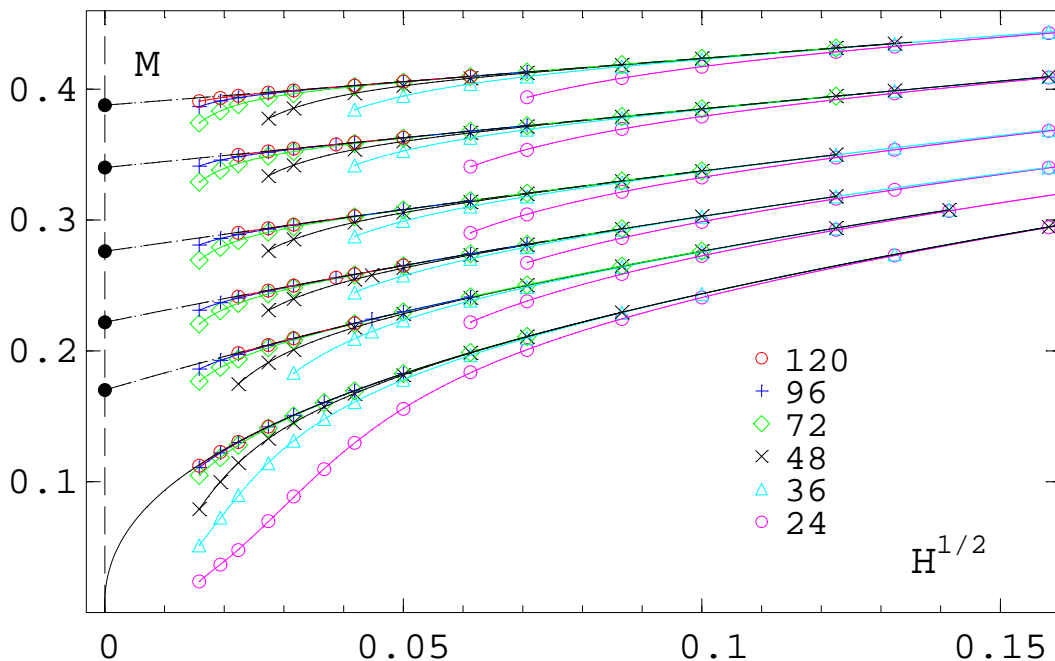


Abbildung 2.6: Die Magnetisierung M des $O(6)$ -Modells bei fünf verschiedenen Temperaturen in der gebrochenen Phase $T < T_c$ und auf der kritischen Isotherme $T = T_c$ (unterste Werte). Die Bezeichnungen sind die gleichen wie in Abbildung 2.5, allerdings werden hier auch Gitter gezeigt, die nicht dem thermodynamischen Limes entsprechen.

Ordnungsparameter M berechnen kann (siehe Kapitel 2.1).

2.4.3 Der universelle Wert der Binderkumulante

Die Binderkumulante spielt eine wichtige Rolle bei der Bestimmung der Universalitätsklasse, da sie am kritischen Punkt einen universellen Wert annimmt. Außerdem ist ihr Finite-Size-Skalenverhalten bei verschwindendem Feld durch

$$g_{r,0}(t, L) = Q_{g_{r,0}}(tL^{1/\nu}) \quad (2.39)$$

gegeben, so dass der Wert am kritischen Punkt nicht von der Gittergröße abhängt, wenn man von etwaigen Skalenkorrekturen absieht. Dieser Wert kann also bestimmt werden, ohne zum thermodynamischen Limes zu gehen. Da der universelle Wert zudem für verschiedene Spinmodelle große Unterschiede aufweist, wird er in der QCD zur Bestimmung der Universalitätsklasse benutzt [39]. Dabei muss man allerdings aufpassen, dass man die richtigen Observablen miteinander vergleicht.

Der Ordnungsparameter in der QCD, das chirale Kondensat, entspricht bei den Spinmodellen der longitudinalen Magnetisierung. Also entspricht die QCD-Binderkumulante g_r^{QCD} der Binderkumulante g_r bei Spinmodellen. Der universelle Wert wird aber bei Spinmodellen im Allgemeinen mit der Definition $g_{r,0}$ berechnet, die außer für $N = 1$ (Ising-Modell) von g_r abweicht.

Glücklicherweise kann man aus $g_{r,0}$ den Wert für g_r recht einfach ausrechnen. Da bei $H = 0$ keine Richtung ausgezeichnet ist, kann man einfach eine Komponente des Vektors \mathbf{S} als S^{\parallel} definieren, zum Beispiel (in verallgemeinerten Polarkoordinaten)

$$S^{\parallel} = |\mathbf{S}| \cos \theta_1 \quad \text{mit } \theta_1 \in [0, \pi]. \quad (2.40)$$

Die Verteilung von S^{\parallel} entspricht dann der in Anhang A hergeleiteten Verteilung $f_N(x)$ ($x = \cos \theta_1$) für Einheitsvektoren, multipliziert mit der unbekanntem Verteilung $g(|\mathbf{S}|)$

$$f(S^{\parallel}) = g(|\mathbf{S}|)f_N(x) \quad \text{mit } x \in [-1, 1], |\mathbf{S}| \in [0, 1], \quad (2.41)$$

wobei natürlich die beiden Verteilungen voneinander unabhängig sind. Damit kann man den Erwartungswert von $S^{\parallel 2}$ und $S^{\parallel 4}$ berechnen

$$\begin{aligned} \langle S^{\parallel 2} \rangle &= \int_0^1 d|\mathbf{S}| \int_{-1}^1 dx (|\mathbf{S}|x)^2 g(|\mathbf{S}|) f_N(x) \\ &= \int_0^1 d|\mathbf{S}| |\mathbf{S}|^2 g(|\mathbf{S}|) \int_{-1}^1 dx x^2 f_N(x) \\ &= \langle |\mathbf{S}|^2 \rangle \int_{-1}^1 dx x^2 f_N(x) \end{aligned} \quad (2.42)$$

$g_{r,0}$		g_r	Modell
1.604(2)	[40]	1.604(2)	Ising
1.242(2)	[41]	1.863(3)	$O(2)$
1.092(3)	[42]	2.184(6)	$O(4)$
1.0554(1)	[38]	2.3747(2)	$O(6)$

Tabelle 2.4: Die universellen Werte g_r und $g_{r,0}$ für verschiedene dreidimensionale $O(N)$ -symmetrische Spinmodelle.

$$\begin{aligned}
\langle S^{\parallel 4} \rangle &= \int_0^1 d|\mathbf{S}| \int_{-1}^1 dx (|\mathbf{S}|x)^4 g(|\mathbf{S}|) f_N(x) \\
&= \langle |\mathbf{S}|^4 \rangle \int_{-1}^1 dx x^4 f_N(x)
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Die Beziehung zwischen den beiden Definitionen der Binderkumulante lautet dann

$$g_r = \frac{\langle S^{\parallel 4} \rangle}{\langle S^{\parallel 2} \rangle^2} = \frac{\langle |\mathbf{S}|^4 \rangle \int_{-1}^1 dx x^4 f_N(x)}{\langle |\mathbf{S}|^2 \rangle^2 \left(\int_{-1}^1 dx x^2 f_N(x) \right)^2} = g_{r,0} \frac{\int_{-1}^1 dx x^4 f_N(x)}{\left(\int_{-1}^1 dx x^2 f_N(x) \right)^2}. \tag{2.44}$$

Rechnet man die Integrale aus, ergibt sich bei den für die QCD interessanten Spinmodellen

$$g_r = g_{r,0} \begin{cases} \frac{3}{2} & N = 2 \\ 2 & N = 4 \\ \frac{9}{4} & N = 6 \end{cases} \tag{2.45}$$

Tabelle 2.4 zeigt die Ergebnisse für $g_{r,0}$ und die daraus berechneten Werte von g_r . Während bei der Definition $g_{r,0}$ die Werte für große N immer kleiner werden und gegen eins streben, werden sie bei der Definition g_r immer größer.

Da man in der QCD nicht bei verschwindender Masse simulieren kann, ist es interessant zu beobachten, wie sich die Binderkumulante auf der kritischen Isotherme für $H \rightarrow 0$ verhält. Dieses ist in den Abbildungen 2.7(a) und 2.8(a) dargestellt. Die großen Gitter steigen erst bei sehr kleinen H an, so dass es vor allem bei $L = 96$ und 120 so aussieht, als ob sie gegen den universellen Wert von $g_{r,0}$ streben würden. Die Abbildungen 2.7(b) und 2.8(b) zeigen die Finite-Size-Skalenfunktionen der Binderkumulanten g_r und $g_{r,0}$. Man sieht, dass die verschiedenen Gitter sehr gut skalieren. Bei großen Werten von HL^{1/ν_c} stimmen die beiden Binderkumulanten überein, da hier der transversale Anteil der Magnetisierung klein wird. Erst bei kleinen Werten streben sie gegen die jeweiligen universellen Werte. Um die Universalitätsklasse eines Modells zu bestimmen, sollte man also kleine Gitter bei schwachem äußerem Feld betrachten.

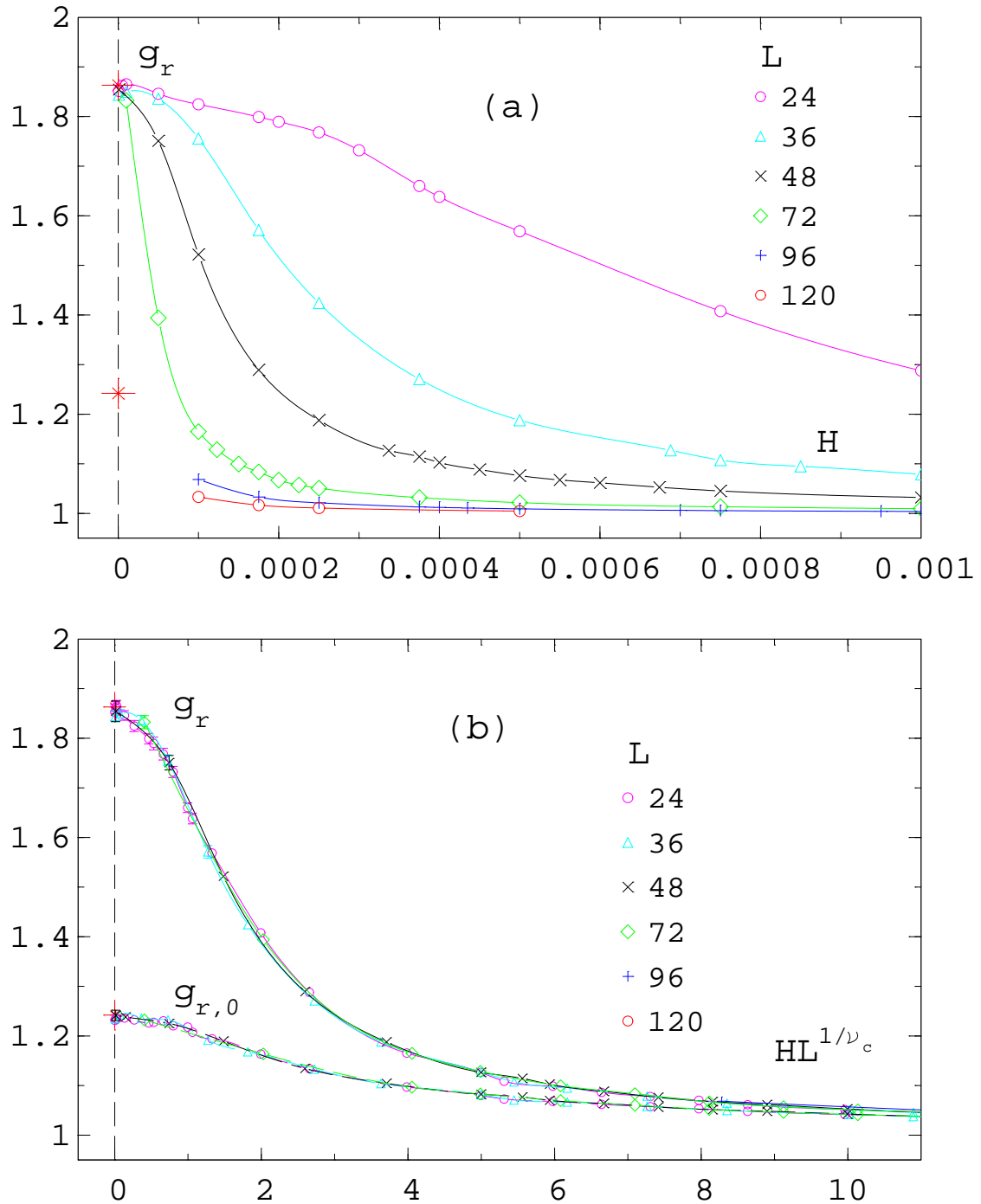


Abbildung 2.7: (a) Die Binderkumulante g_r des $O(2)$ -Spinmodells auf der kritischen Isotherme. (b) Finite-Size-Skalenplot von g_r und von $g_{r,0}$. Die roten Sterne repräsentieren den universellen Wert von g_r beziehungsweise $g_{r,0}$ bei $H = 0$.

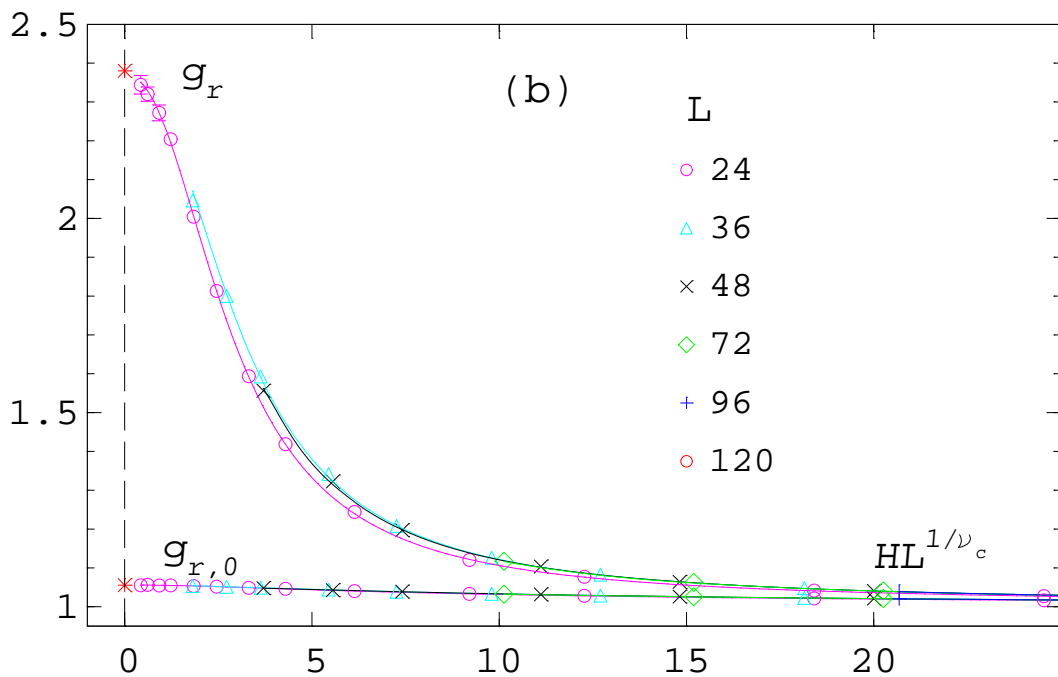
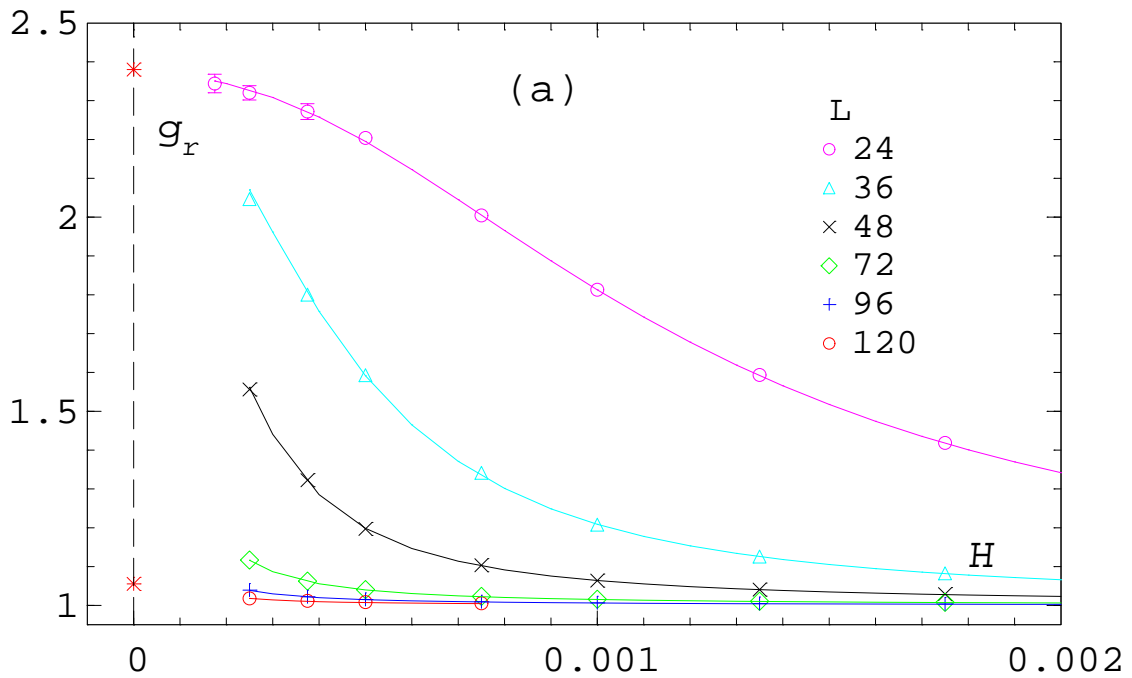


Abbildung 2.8: (a) Die Binderkumulante g_r des $O(6)$ -Spinmodells auf der kritischen Isotherme. (b) Finite-Size-Skalenplot von g_r und von $g_{r,0}$. Die roten Sterne repräsentieren den universellen Wert von g_r beziehungsweise $g_{r,0}$ bei $H = 0$.

Kapitel 3

Ergebnisse der aQCD

Wie bereits in Kapitel 1.3 beschrieben, nimmt man an, dass der chirale Phasenübergang der QCD mit zwei adjungierten Fermionen für verschwindende Quarkmasse einen kontinuierlichen Phasenübergang besitzt, der in der gleichen Universalitätsklasse wie das dreidimensionale, $O(6)$ -symmetrische Spinmodell liegen soll. Auf dem Gitter reduziert sich jedoch die chirale Symmetrie, so dass man für die Kogut-Susskind-Fermionwirkung einen Phasenübergang in der $O(2)$ -Universalitätsklasse erwartet (siehe Kapitel 1.5.4).

In diesem Kapitel werden sowohl alte als auch neue Simulationsergebnisse der aQCD analysiert. Nach einer kurzen Rekapitulation der Ergebnisse aus Referenz [1] und einem Überblick über die Simulationsparameter und -ergebnisse wird zuerst die chirale kritische Kopplung bestimmt. Daraufhin wird der Goldstone-Effekt in der chiral gebrochenen Phase untersucht, insbesondere die Frage, ob und wie er durch den Deconfinement-Phasenübergang beeinflusst wird. Dadurch kann auch die effektive Dimension der Theorie bestimmt werden, da diese die Divergenz der Suszeptibilität bestimmt. Anschließend werden universelle Größen wie kritische Exponenten und Skalenfunktionen untersucht und mit ihren in Kapitel 2 präsentierten Pendanten der $O(2)$ - und $O(6)$ -Spinmodelle verglichen, um die Universalitätsklasse des chiralen Phasenübergangs zu bestimmen. Zuletzt wird noch versucht, den universellen Wert der Binderkumulante am kritischen Punkt zu bestimmen.

Um den Vergleich mit den Spinmodellen durchführen zu können, muss man zuerst wissen, welche Parameter in der QCD den Skalenfeldern t und h bei den Spinmodellen entsprechen. Die Temperatur ist in der QCD durch $T = 1/N_\tau a$ gegeben. Der Gitterabstand a wiederum hängt über die Callan-Symanzik β -Funktion mit der Kopplung β zusammen. Diese wurde mit der Störungstheorie in zweiter Ordnung für kleine Kopplungen g (also große β) und $m_q = 0$ als

$$a(\beta)\Lambda_L \equiv R(\beta) = \left(\frac{6}{\beta}b_0\right)^{\frac{-b_1}{2b_0}} \exp\left(-\frac{\beta}{12b_0}\right) \quad (3.1)$$

berechnet [43], wobei Λ_L der Lambda-Parameter für Gitterrechnungen ist. Die Konstanten b_0 und b_1 hängen von der Anzahl und der Darstellung der Fermionen ab [44]

$$b_0 = \frac{1}{16\pi^2} \left(\frac{11}{3} C_2(G) - \frac{4}{3} N_F T(R) \right), \quad (3.2)$$

$$b_1 = \frac{1}{16\pi^2} \left(\frac{34}{3} C_2^2(G) - \frac{20}{3} C_2(G) N_F T(R) - 4 C_2(R) N_F T(R) \right), \quad (3.3)$$

wobei $C_2(G)$ den Eigenwert des quadratische Casimir-Operators der adjungierten Darstellung der Eichgruppe G , $C_2(R)$ den Eigenwert des quadratische Casimir-Operators der Darstellung R der Fermionen bezeichnet. $T(R)$ ist durch $\text{Tr}(t_a t_b) = T(R) \delta_{ab}$ definiert, wobei die t_a die Generatoren von R sind. In unserem Fall ist G die $SU(3)$ und R deren adjungierte Darstellung, das heißt $C_2(G) = C_2(R) = T(R) = N_c = 3$.

Damit ergeben sich für $N_f = 2$ die Konstanten^a

$$b_0 = \frac{3}{16\pi^2} \quad b_1 = -\frac{90}{(16\pi^2)^2} \quad (3.4)$$

und die β -Funktion

$$R_{adjoint}(\beta) = \left(\frac{9}{8\pi^2 \beta} \right)^5 \exp \left(-\frac{4\pi^2}{9} \beta \right). \quad (3.5)$$

Vergleicht man dieses Ergebnis mit der Funktion der fundamentalen QCD

$$R_{fund.}(\beta) = \left(\frac{29}{8\pi^2 \beta} \right)^{-345/841} \exp \left(-\frac{4\pi^2}{29} \beta \right), \quad (3.6)$$

so zeigt sich, dass in der adjungierten QCD wegen des größeren Faktors in der Exponentialfunktion eine kleinere Änderung von β für eine große Änderung des Gitterabstandes ausreicht.

Mit Hilfe dieser Funktion kann man nun $T - T_c$ berechnen

$$T - T_c = \frac{1}{N_\tau} \left(\frac{1}{a(\beta)} - \frac{1}{a(\beta_c)} \right). \quad (3.7)$$

Setzt man die β -Funktion ein und entwickelt für kleine $\beta - \beta_c$, erhält man

$$\begin{aligned} T - T_c &\approx \frac{\Lambda_L}{N_\tau} \left(\frac{6}{\beta_c} b_0 \right)^{\frac{b_1}{2b_0}} \exp \left(\frac{\beta_c}{12b_0} \right) \left(1 + \frac{1}{12b_0} (\beta - \beta_c) - 1 \right) \\ &= \text{const.} (\beta - \beta_c), \end{aligned} \quad (3.8)$$

^aIn [1] wurde b_1 falsch berechnet, da dort nicht die Eigenwerte der adjungierten, sondern der fundamentalen Darstellung benutzt wurden.

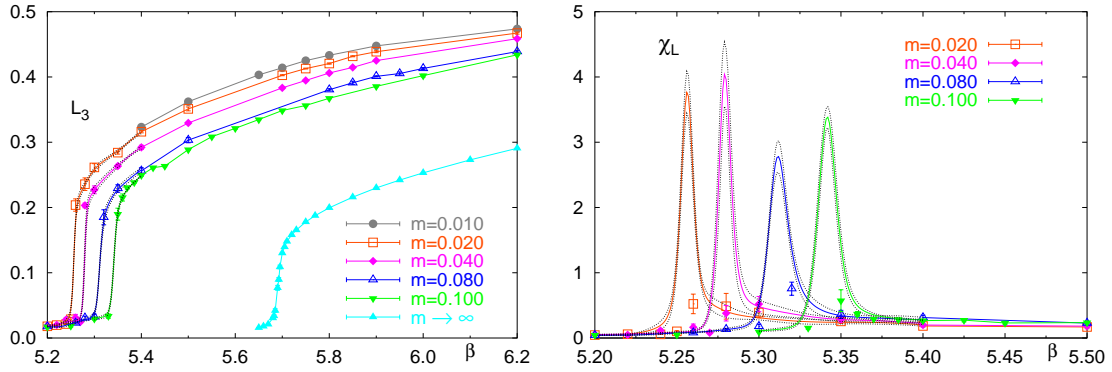


Abbildung 3.1: Bilder aus Referenz [1]. Links der Polyakov-Loop L_3 , rechts dessen Suszeptibilität χ_L , für einige Massen (m entspricht in unserer Nomenklatur $m_q a$) auf dem $8^3 \times 4$ Gitter. Zum Vergleich sind auch Daten der reinen Eichtheorie ($m_q a \rightarrow \infty$) angegeben. Die gepunkteten schwarzen Linien kennzeichnen die Fehlerkorridore der Ferrenberg-Swendsen Interpolationen.

so dass man statt der Temperatur die Variable β benutzen kann.

Die Rolle des äußeren, die Symmetrie explizit brechenden Feldes spielt in der QCD bis auf den Faktor a die Quarkmasse. Die h entsprechende dimensionslose Größe ist also $m_q a$.

3.1 Bekannte Ergebnisse der aQCD

Die Phasenstruktur der aQCD wurde bereits in einer früheren Doktorarbeit untersucht [1]. In Abbildung 3.1 sind deren Ergebnisse für den Polyakov-Loop L_3 und dessen Suszeptibilität χ_L für verschiedene Massen aufgetragen. Wie man sieht, zeigt der Polyakov-Loop einen deutlichen Sprung um etwa $\beta = 5.3$ herum, der sich mit abnehmender Masse zu kleineren β verschiebt. An derselben Stelle zeigt die Suszeptibilität bei konstanter Masse ein scharfes Maximum, wie man das an einem Phasenübergang erwartet.

Die Lage dieser Maxima bestimmt die kritischen Kopplungen, die in [1] mit Hilfe eines linearen Fits zu $m_q a = 0$ extrapoliert wurden, mit dem Ergebnis $\beta_d^{adjoint}(m_q a = 0) = 5.236(2)$. Dieser Wert liegt innerhalb des Fehlers an der gleichen Stelle wie in der fundamentalen QCD, $\beta_d^{fund}(m_q a = 0) = 5.233(7)$ [45], die Lage des Deconfinement-Phasenübergangs bleibt also unverändert. Bei der Untersuchung der Plaquette am kritischen Punkt ergab sich ein klares Zwei-Zustands-Signal, so dass der bei einer Brechung der $Z(3)$ -Symmetrie erwartete Phasenübergang erster Ordnung bestätigt werden konnte.

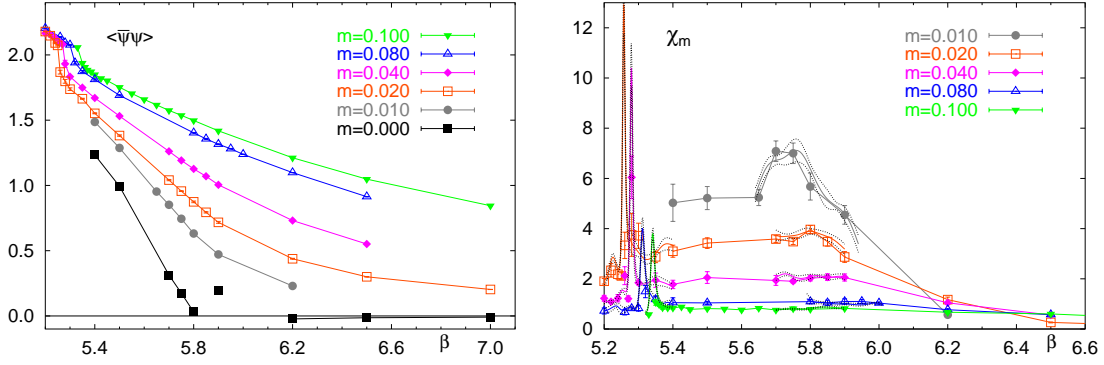


Abbildung 3.2: Bilder aus Referenz [1]. Links das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ mit den Extrapolationen zu $m_q a = 0$ (m entspricht in unserer Nomenklatur $m_q a$), rechts dessen Suszeptibilität (χ_m entspricht bei uns $\frac{1}{2}\chi_{dis}$) mit Ferrenberg-Swendsen Interpolationen (die Fehlerkorridore sind durch gepunktete schwarze Linien gekennzeichnet), für einige Masse auf dem $8^3 \times 4$ Gitter.

Die Lokalisierung des chiralen Phasenübergangs gestaltete sich allerdings schwieriger. Abbildung 3.2 zeigt die Ergebnisse für das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ und die Suszeptibilität χ_{dis} für verschieden Massen. Man erkennt deutlich einen kleinen Sprung im chiralen Kondensat beim Deconfinement-Phasenübergang, und auch die Suszeptibilität zeigt hier ein scharfes Maximum. Ein zweites, weitaus kleineres und breiteres Maximum ist bei den beiden kleinsten Massen zu erkennen, ein Hinweis auf den chiralen Phasenübergang. In [1] werden die Positionen der Maxima, also der pseudokritischen Kopplungen, als $\beta_{pc}(m_q a = 0.02) = 5.80(3)$ und $\beta_{pc}(m_q a = 0.01) = 5.77(3)$ angegeben (mit ziemlich optimistischen Fehlerabschätzungen).

Zusätzlich wurden die Ergebnisse des chiralen Kondensats bei konstantem β mit dem Ansatz

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle(\beta, m_q a) = a_0 + \bar{a}_1(m_q a)^{1/2} + a_1(m_q a) + a_2(m_q a)^2 + a_3(m_q a)^3 \quad (3.9)$$

zu verschwindender Masse extrapoliert, wobei bei $\beta > 5.8$ der Parameter \bar{a}_1 auf Null gesetzt wird. Dieser Ansatz wurde durch das Goldstone-Verhalten in der chiral gebrochenen Phase gerechtfertigt. In der symmetrischen Phase wurde eine bei kleinen Massen lineare Massenabhängigkeit des chiralen Kondensates angenommen. Die Extrapolationen mit diesem Ansatz sind auch in der Abbildung 3.2 bei dem chiralen Kondensat eingezeichnet. Aus der Tatsache, dass die Extrapolation bei $\beta < 5.8$ einen Wert größer Null ergibt und darüber mit Null verträglich ist, wurde geschlossen, dass der chirale kritische Punkt bei $\beta_c = 5.80(5)$ liegt.

Diese Schlussfolgerung ist problematisch. Zum einen ist der obige Ansatz in der gebrochene Phase falsch, da das Goldstone-Verhalten eine Entwicklung in Potenzen von $(m_q a)^{1/2}$ ist, das heißt es fehlen $(m_q a)^{3/2}$ und $(m_q a)^{5/2}$. Zum anderen enthält der Ansatz so viele Parameter, dass man fast alles damit fitten könnte.

Am auffälligsten ist aber, dass die Abfolge der pseudokritischen Kopplungen darauf hin deutet, dass diese mit abnehmender Masse kleiner werden. Die kritische Kopplung muss also unterhalb der pseudokritischen Kopplung bei der kleinsten Masse, $\beta_{pc}(m_q a = 0.01) = 5.77(3)$, liegen. Daher sind für die Bestimmung der kritischen Kopplung noch weitere Untersuchungen nötig.

3.2 Allgemeines zu den Simulationen

Die in den nächsten Abschnitten präsentierten Ergebnisse wurden in Simulationen mit der Standard-Eichwirkung (siehe Kapitel 1.5.1) und der Kogut-Susskind Fermionwirkung für zwei adjungierte Fermionen (Kapitel 1.5.5) erzeugt. Es wurde keine verbesserten Wirkungen benutzt, um auf den Ergebnissen in [1] aufbauen zu können. Es hat sich auch bei Simulationen mit fundamentalen Fermionen gezeigt [46], dass die Vorteile einer verbesserten Wirkung, in diesem Fall der Bielefelder p4-Wirkung, bei der Untersuchung des kritischen Verhaltens durch die effektive Erhöhung der physikalischen Massen und den zusätzlichen Aufwand an Computerzeit zunichte gemacht werden.

Die Simulationen wurden auf den APE100/QUADRICS-Rechnern Q2 und Q4open mit 16 beziehungsweise 32 Prozessoren (maximal 50 MFLOPs pro Prozessor) und auf der APEmille mit insgesamt 128 Prozessoren (maximal 500 MFLOPs pro Prozessor) durchgeführt. Auf den QUADRICS-Rechnern wurden nur $8^3 \times 4$ -Gitter gerechnet, auf der APEmille $8^3 \times 4$, $12^3 \times 4$ (im *board*-Modus mit je 8 Prozessoren) und $16^3 \times 4$ -Gitter (im *unit*-Modus mit je 32 Prozessoren). Es wurde der in Kapitel 1.5.5 beschriebene, für die adjungierten Fermionen modifizierte Hybrid- Φ -Algorithmus benutzt.

Für diese Arbeit wurde ein β -Bereich von $\beta = 5.1$ (unterhalb des Deconfinement-Phasenübergangs) bis $\beta = 6.5$ (oberhalb des chiralen Phasenübergangs) und ein Massenbereich von $m_q a = 0.1$ bis $m_q a = 0.005$ untersucht.

Die Trajektorienlänge des Leapfrog-Updates wird (mit wenigen Ausnahmen) auf $\tau = n \delta\tau = 0.25$ festgesetzt. Da bei jedem Leapfrog-Schritt die Matrix $M^\dagger M$ invertiert werden muss, bedeutet eine kleine Schrittweite $\delta\tau$ einen großen Zeitaufwand, da man mehr Schritte n und damit mehr Inversionen für eine Trajektorie braucht. Allerdings sinkt bei zu großer Schrittweite die Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Metropolis-Schritts stark ab. Die Schrittweite wurde daher so eingestellt, dass die Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Metropolis-Schritts im Bereich von 60-80% lag. Die Schrittweite muss um so kleiner gewählt werden, je kleiner die Masse $m_q a$ und je größer die räumliche Ausdehnung N_σ des Gitters ist. β hingegen beeinflusst die Schrittweite nur in geringem Maße, nur bei β -Werten in der Nähe des Deconfinement-Phasenübergangs und unterhalb davon benötigt man eine etwas kleinere Schrittweite.

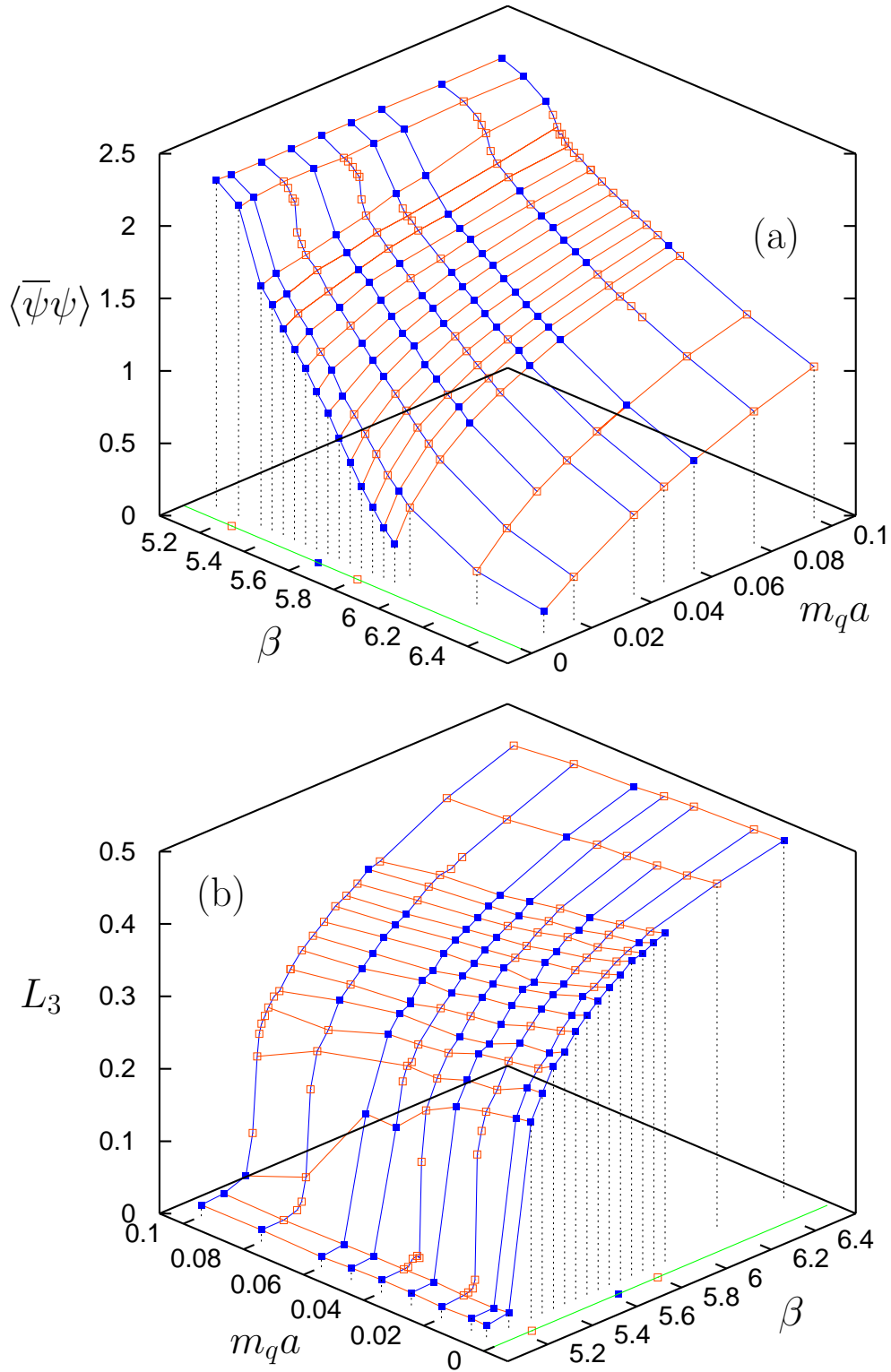


Abbildung 3.3: Dreidimensionaler Plot des chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ (a) und des Polyakov-Loops L_3 (b) für alle β - und $m_q a$ -Werte bei $N_\sigma = 8$ (zur besseren Ansicht ist der untere Plot um 90° gedreht). Die blauen Linien verbinden gleiche $m_q a$, die roten Linien gleiche β . Die offenen roten Quadrate bezeichnen alte Simulationen, die ausgefüllten blauen Quadrate neue Simulationen. Die roten Quadrate auf der grünen $m_q a = 0$ -Linie bezeichnen die alten Schätzungen für die beiden Phasenübergangspunkte, das blaue Quadrat die neue Schätzung für den chiralen Phasenübergangspunkt. Die schwarzen, gepunkteten Linien sollen die Höhe verdeutlichen.

Das chirale Kondensat wird mit der Methode des so genannten „Noisy Estimators“ gemessen, das heißt, das Inverse der Fermionmatrix wird mit Hilfe von 25 gaussverteilten Zufallsvektoren geschätzt.

Das chirale Kondensat und der Polyakov-Loop wird nach jeder Trajektorie gemessen. Die Autokorrelationszeit des chiralen Kondensats liegt zwischen 5 und 200. Es wurden zwischen 500 und 2000 Trajektorien gemessen.

In Anhang B sind die Ergebnisse der Simulationen dargestellt. Abbildung 3.3(a) zeigt eine dreidimensionale Übersicht des chiralen Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ bei allen β - und $m_q a$ -Werten für $N_\sigma = 8$, Abbildung 3.3(b) zeigt das gleiche für den Polyakov-Loop L_3 , wobei die Ansicht um 90° gedreht ist. Um zu erkennen, welche Punkte für diese Arbeit zusätzlich simuliert wurden, sind die alten (offene rote Quadrate) und die neuen Ergebnisse (ausgefüllte blaue Quadrate) unterschiedlich gekennzeichnet. Auf der grünen $m_q a = 0$ -Linie sind die Abschätzungen $\beta_d = 5.236(2)$ und $\beta_c = 5.80(5)$ aus [1] (rote offene Quadrate) und die neue Abschätzung $\beta_c = 5.624(2)$ (gefülltes blaues Quadrat) eingezeichnet, die im nächsten Kapitel erläutert wird.

Wiederum erkennt man sehr deutlich den Sprung des Polyakov-Loops um $\beta = 5.3$ herum, der den Phasenübergang erster Ordnung vom Confinement zum Deconfinement anzeigt. Dabei muss man berücksichtigen, das in der Abbildung die Punkte nur durch Geraden verbunden sind. Das heißt, nur bei den Massen, die viele Punkte im kritischen Bereich enthalten ($m_q a = 0.02, 0.04, 0.08$ und 0.10), ist der Übergang richtig wiedergegeben. Bei den anderen Massen entsprechen die Verbindungslinien an dieser Stelle nicht dem wahren Verhalten.

Dieser Sprung ist an der gleichen Stelle auch im chiralen Kondensat sichtbar, fällt hier aber deutlich kleiner aus. Der chirale Phasenübergang hingegen, von dem man annimmt, dass er ein kontinuierlicher Phasenübergang ist, ist selbst im chiralen Kondensat nur andeutungsweise bei den kleinsten Massen-Werten zu erkennen, im Polyakov-Loop sieht man davon gar nichts.

3.3 Die kritische Kopplung

Wie in Kapitel 3.1 festgestellt, ist die bisherige Abschätzung der chiralen kritische Kopplung β_c nicht sehr zuverlässig. In diesem Kapitel wird daher mit den zusätzlichen Daten und einigen anderen Methoden als den in [1] verwendeten eine genauere und zuverlässigere Bestimmung versucht. Dabei wird im Folgenden immer davon ausgegangen, dass ein kontinuierlicher Phasenübergang vorliegt.

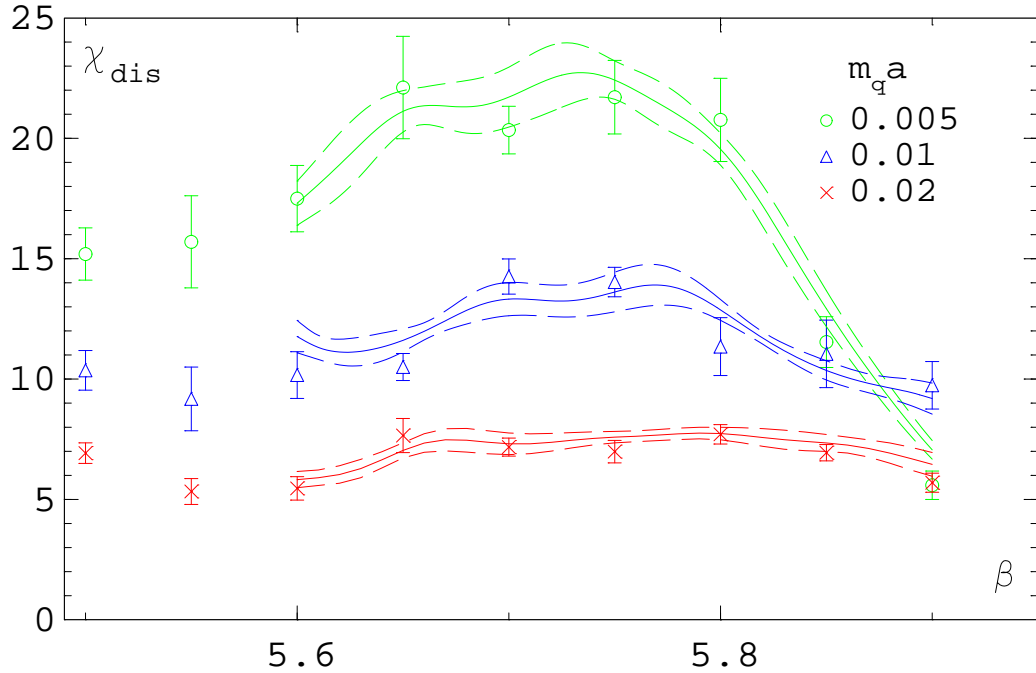


Abbildung 3.4: χ_{dis} für die drei kleinsten Massen $m_q a = 0.005, 0.01$ und 0.02 auf dem $8^3 \times 4$ -Gitter. Die durchgezogenen Linien sind die Mittelwerte der Ferrenberg-Swendsen Interpolation, die gestrichelten Linien deren Fehlerkorridor.

3.3.1 Extrapolation der pseudokritischen Werte

Die am häufigsten gebrauchte Methode zur Abschätzung der kritischen Kopplung besteht darin, die pseudokritischen Kopplungen $\beta_{pc}(m_q a) > \beta_c$ bei verschiedenen Massen zu bestimmen und dann zu $m_q a = 0$ zu extrapolieren. Die pseudokritische Kopplung bei der Masse $m_q a$ ist durch das Maximum der Suszeptibilität bei dieser Masse bestimmt. Für die Extrapolation betrachtet man die zu (2.32) äquivalente Skalenfunktion der chiralen Suszeptibilität

$$\chi_m = \frac{(m_q a)^{1/\delta-1}}{(m_q a)_0} f_\chi(z) \quad (3.10)$$

mit^b $z = \beta_r/m^{1/\Delta}$ ($\Delta = \beta_e \delta$) und den analog zu t und h bei den Spinmodellen (Kapitel 2.3) normierten Größen $\beta_r = (\beta - \beta_c)/\beta_0$ und $m = (m_q a)/(m_q a)_0$. Für ein Maximum muss die Ableitung der Suszeptibilität nach β_r verschwinden

$$\frac{\partial \chi_m}{\partial \beta_r} = \frac{m^{1/\delta-1}}{(m_q a)_0} \frac{\partial f_\chi(z)}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \beta_r} = 0. \quad (3.11)$$

^bDer kritische Exponent β wird im folgenden als β_e bezeichnet, um Verwechslungen mit der Kopplung β auszuschließen.

$m_q a$	0.005	0.01	0.02
β_{pc}	5.73(8)	5.74(6)	5.75(10)

Tabelle 3.1: Die pseudokritischen Punkte β_{pc} auf dem $8^3 \times 4$ -Gitter für die drei kleinsten Massen.

Nur der mittlere Term kann für $m_q a > 0$ verschwinden, so dass die pseudokritischen Punkte durch einen festen Wert $z = z_{pc}$ gekennzeichnet sind. Damit kann man die kritische Kopplung durch den Ansatz

$$\beta_{pc} = \beta_c + \frac{z_{pc}\beta_0}{((m_q a)_0)^{1/\Delta}} (m_q a)^{1/\Delta} \quad (3.12)$$

bestimmen. Zusätzlich könnten noch Korrekturen durch irrelevante Exponenten berücksichtigt werden, aber da wir nur drei pseudokritische Kopplungen bestimmen können (siehe unten), ist ein Fit mit mehr als zwei Parametern nicht angebracht. Selbst dazu muss man voraussetzen, dass β_e und δ bekannt sind.

Abbildung 3.4 zeigt die Suszeptibilität χ_{dis} in der Umgebung der pseudokritischen Kopplungen für die drei kleinsten Massen auf dem $8^3 \times 4$ -Gitter. Eingezeichnet sind sowohl die Datenpunkte aus den Simulationen sowie die Interpolation dieser Punkte mit der Multi-Histogramm-Methode von Ferrenberg und Swendsen [48, 49]. Die Daten der größeren Gitter werden hier nicht gezeigt, da deren Statistik nicht für eine Ferrenberg-Swendsen Interpolation ausreicht. Selbst bei dem hier gezeigten $8^3 \times 4$ -Gitter ist die Statistik nicht besonders groß und nimmt zusätzlich an den Rändern des Interpolationsbereichs drastisch ab, so dass der Interpolation hier nur bedingt vertraut werden kann.

Betrachtet man den Verlauf der Interpolationen, so erkennt man bei der kleinsten Masse $m_q a = 0.005$ ein ausgeprägtes, allerdings recht breites Maximum bei $\beta \approx 5.73$. Die nächsthöhere Masse $m_q a = 0.01$ hat ein wesentlich schwächer ausgeprägtes, doppeltes Maximum bei $\beta \approx 5.74$. Bei der größten Masse $m_q a = 0.02$ ist nur noch ein breites Plateau zwischen $\beta = 5.65$ und $\beta = 5.85$ zu erkennen.

Tabelle 3.1 zeigt unsere Abschätzungen für die pseudokritischen Werte. Sie weichen etwas von den Werten in [1] ab, da einige neue Punkte dazu gekommen sind und die Fehler etwas größer angesetzt wurden. Setzt man nun O(2)-Exponenten ($1/\Delta = 0.5995$) in Ansatz (3.12) ein, erhält man für die kritische Kopplung $\beta_c = 5.72(16)$ bei einem $\chi^2/d.o.f.$ von $6 \cdot 10^{-4}$. Mit O(6)-Exponenten ($1/\Delta = 0.4922$) erhält man $\beta_c = 5.71(19)$ bei einem $\chi^2/d.o.f.$ von $4 \cdot 10^{-4}$.

Diese Methode hilft also bei einer genaueren Bestimmung des kritischen Punktes nicht viel weiter, zeigt aber nochmal, dass die kritische Kopplung deutlich kleiner als $\beta_c = 5.8$ sein muss.

β	$\ln d_c$	$1/\delta$	Fitbereich $m_q a$	$\chi^2/d.o.f.$	Max. $\chi^2/d.o.f.$
5.8	1.510(37)	0.4246(97)	0.005 - 0.03	7.51	32.63
5.75	1.336(25)	0.3549(65)	0.005 - 0.03	4.44	28.00
5.7	1.124(23)	0.2786(60)	0.005 - 0.03	1.05	10.43
5.65	1.026 (9)	0.2322(26)	0.005 - 0.06	1.64	3.00
5.6	0.949 (4)	0.1921(17)	0.005 - 0.10	5.25	9.11
5.55	0.822(19)	0.1423(50)	0.005 - 0.04	4.18	7.51
5.5	0.755(19)	0.1083(46)	0.005 - 0.03	5.62	8.79

Tabelle 3.2: Fitparameter für den Ansatz $\ln(\langle\bar{\psi}\psi\rangle) = \ln d_c + \frac{1}{\delta} \ln(m_q a)$. Der Fitbereich ist durch das Minimum von $\chi^2/d.o.f.$ bei Variation der oberen Masse bestimmt, wobei der Fit mindestens vier Datenpunkte enthalten soll. Die letzte Spalte enthält das Maximum des $\chi^2/d.o.f.$ bei Variation der oberen Masse auch über den angegebenen Fitbereich hinaus.

3.3.2 Das Skalenverhalten auf der kritischen Isotherme

Eine andere Möglichkeit, den kritischen Punkt zu lokalisieren, besteht darin, zu untersuchen, bei welchem β sich die Daten am besten durch das Skalenverhalten auf der kritischen Isotherme beschreiben lassen, das heißt der Fit das kleinste $\chi^2/d.o.f.$ hat. Diese so genannte χ^2 -Methode wurde zuerst in [50] für Finite-Size Skaleneffekte vorgeschlagen.

Die Massenabhängigkeit des chiralen Kondensats ist auf der kritischen Isotherme für kleine $m_q a$ durch

$$\langle\bar{\psi}\psi\rangle(\beta_c, m_q a) = d_c(m_q a)^{1/\delta} \quad (3.13)$$

gegeben. Da Exponentialfunktionen nur sehr schwierig zu fitten sind, logarithmiert man in so einem Fall die Daten und macht damit einen Geraden-Fit. Die Ergebnisse dieser Fits zeigt Tabelle 3.2.

Zuerst ist anzumerken, dass zwar bei einer Einschränkung des Fitbereichs auf die drei kleinsten Massen das $\chi^2/d.o.f.$ bei vielen Kopplungen kleiner wird, aber dadurch auch die Vergleichbarkeit dieses Parameters schwieriger wird, da ein einzelner, zufällig abweichender Datenpunkt einen großen Einfluss hat.

Das andere Extrem, einfach immer alle Punkte zu benutzen, hat den Nachteil, dass man von vornherein nicht wissen kann, bis zu welcher Masse der obige Ansatz gilt. Wenn man nicht annimmt, dass die Skalenregion sehr groß ist, müßte man dann zusätzliche Korrekturterme mit weiteren Exponenten einführen, die die Fits sehr schwierig und bei zu vielen freien Parametern sehr instabil machen würden.

Den kleinste $\chi^2/d.o.f.$ -Wert hat der Fit bei $\beta = 5.7$, allerdings gilt dies nur bei einem sehr kleiner Fitbereich. Nimmt man weitere Massen hinzu, wird der Fit genau wie bei $\beta = 5.75$ und $\beta = 5.8$ schnell schlechter. Bei $\beta = 5.65$ ist der $\chi^2/d.o.f.$ -Wert auch relativ klein, variiert aber nur sehr wenig bei Änderung der oberen Massengrenze.

Bei $\beta = 5.6$ ist der $\chi^2/d.o.f.$ -Wert zwar relativ groß, im Gegensatz zu den anderen Kopplungen wird es aber kleiner, je mehr Massen man in den Fit mit einbezieht. Dies liegt an der kleinsten Masse; lässt man diese weg, sinkt der $\chi^2/d.o.f.$ -Wert auf die gleiche Größenordnung wie bei $\beta = 5.65$. Das $8^3 \times 4$ - und das $16^3 \times 4$ -Gitter liefern hier gut übereinstimmende Ergebnisse, so dass ein Finite-size-Effekt unwahrscheinlich ist. Allerdings ist die Statistik bei dem $16^3 \times 4$ -Gitter sehr gering, so dass diese Möglichkeit nicht ausgeschlossen werden kann.

Bei den beiden kleinsten Kopplungen wiederum ist der minimale $\chi^2/d.o.f.$ -Wert recht groß und steigt bei Hinzunahme weiterer Massen weiter an, allerdings nicht so stark wie bei den großen Kopplungen.

Der Fit funktioniert also bei $\beta = 5.65$ am besten, wobei $\beta = 5.6$ auch noch möglich ist, wenn man die kleinste Masse außer Acht lässt. Betrachtet man nun noch die Ergebnisse für den kritischen Exponenten $1/\delta$, so ergibt sich ein weiterer Anhaltspunkt für diese Einschätzung. Bei den Spinmodellen liegt dieser Wert bei $1/\delta = 0.2092$ (sowohl für $O(2)$ als auch $O(6)$). Wenn man also annimmt, dass die aQCD in der Universalitätsklasse eines dieser Modelle liegt, sollte sich die kritische Kopplung ebenfalls zwischen $\beta = 5.6$ und $\beta = 5.65$ befinden.

Aus dem Skalenverhalten am kritischen Punkt kann man auch noch auf eine andere Weise die kritische Kopplung bestimmen. Nimmt man an, dass es für das chirale Kondensat eine Skalenfunktion $f_{\bar{\psi}\psi}(z)$ analog zu $f_G(z)$ bei den Spinmodellen (siehe Kapitel 2.3) gibt, so gilt in der kritischen Region, das heißt in dem Bereich, in dem Skalenkorrekturen vernachlässigbar sind, der Ansatz

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle(z) = m^{1/\delta} f_{\bar{\psi}\psi}(z). \quad (3.14)$$

Für kleine $|z|$ kann man eine Taylorentwicklung von $f_{\bar{\psi}\psi}(z)$ durchführen und erhält

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle(z) = \frac{(m_q a)^{1/\delta}}{(m_q a)_0^{1/\delta}} (f_{\bar{\psi}\psi}(0) + f'_{\bar{\psi}\psi}(0) z + \dots). \quad (3.15)$$

Aus der Normierungsbedingung $f_{\bar{\psi}\psi}(0) = 1$ und der Gleichung (3.13) folgt

$$(m_q a)_0^{-1/\delta} = d_c, \quad (3.16)$$

und damit gilt für die Massenabhängigkeit des chiralen Kondensats bei kleinen $|z|$ und konstanter Kopplung β

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle(m_q a) = (m_q a)^{1/\delta} (d_c + d_c^1 (\beta - \beta_c) (m_q a)^{-1/\Delta} + \dots) \quad (3.17)$$

mit $d_c^1 = f'_{\bar{\psi}\psi}(0) d_c^{(1-1/\beta_c)}/\beta_0$.

Die kritische Kopplung ist also dadurch gekennzeichnet, dass bis auf den ersten alle Terme in der Klammer verschwinden. Der Vorteil dieses Ansatzes liegt darin, dass er bei mittleren Massen gilt – nicht zu klein wegen des Terms $(m_q a)^{-1/\Delta}$, nicht zu groß, damit man sich in der kritischen Region befindet.

β	d_c	$d_c^1(\beta - \beta_c)$	Fitbereich $m_q a$	$\chi^2/d.o.f.$
5.9	2.736 (8)	-0.1101(16)	0.03 - 0.10	2.19
5.85	2.704 (8)	-0.0868(14)	0.02 - 0.10	1.53
5.8	2.706 (6)	-0.0713(12)	0.02 - 0.10	1.16
5.75	2.689 (6)	-0.0508(11)	0.02 - 0.10	1.30
5.7	2.662 (6)	-0.0283(10)	0.01 - 0.10	1.56
5.65	2.654 (5)	-0.0089 (8)	0.005 - 0.10	1.68
5.6	2.659 (7)	0.0080(13)	0.01 - 0.10	2.97
5.55	2.624 (9)	0.0342(20)	0.03 - 0.10	2.30
5.5	2.606(13)	0.0583(24)	0.03 - 0.10	1.99

Tabelle 3.3: Fitparameter für den Ansatz (3.17) mit $O(2)$ -Exponenten.

β	d_c	$d_c^1(\beta - \beta_c)$	Fitbereich $m_q a$	$\chi^2/d.o.f.$
5.9	2.862 (8)	-0.1722(16)	0.02 - 0.10	2.43
5.85	2.811 (9)	-0.1449(21)	0.01 - 0.10	2.89
5.8	2.793 (6)	-0.1192(17)	0.01 - 0.10	0.75
5.75	2.748 (6)	-0.0841(15)	0.01 - 0.10	1.20
5.7	2.693 (6)	-0.0463(14)	0.005 - 0.10	2.39
5.65	2.669 (6)	-0.0159(15)	0.005 - 0.10	1.73
5.6	2.647 (8)	0.0141(22)	0.01 - 0.10	2.70
5.55	2.585(11)	0.0563(34)	0.03 - 0.10	2.07
5.5	2.538(15)	0.0961(40)	0.03 - 0.10	1.48

Tabelle 3.4: Fitparameter für den Ansatz (3.17) mit $O(6)$ -Exponenten.

Die Tabellen 3.3 und 3.4 zeigen die Ergebnisse für Fits mit $O(2)$ - und $O(6)$ -Exponenten. Die untere Grenze für den Fitbereich ist jeweils so gewählt, dass bei Hinzunehmen der nächstkleineren Masse das $\chi^2/d.o.f.$ stark ansteigt, während das Weglassen der kleinsten Masse des angegebenen Fitbereichs das $\chi^2/d.o.f.$ kaum ändert. Eine Variation der oberen Grenze ändert das $\chi^2/d.o.f.$ durchweg nur gering, dass heißt der Bereich mittlerer Massen reicht (mindestens) bis $m_q a = 0.10$.

Es fällt auf, dass die Amplitude d_c eine leichte, bei $O(6)$ -Exponenten stärker als bei $O(2)$ -Exponenten ausgeprägte β -Abhängigkeit zeigt, die es eigentlich nicht haben sollte. Im Bereich $5.6 \leq \beta \leq 5.7$ ist die Variation von d_c allerdings kleiner als außerhalb, für $O(2)$ -Exponenten verschwindet sie innerhalb der Fehler sogar ganz. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die kritische Region nur diesen Bereich umfasst, denn nur dort beschreibt die Skalenfunktion das kritische Verhalten und gilt somit der Ansatz (3.17). Berücksichtigt man nur die Variation von d_c in diesem Bereich, so ergibt sich mit $O(2)$ -Exponenten ein Wert von $d_c = 2.66(1)$, mit $O(6)$ -Exponenten ein Wert von $d_c = 2.67(3)$.

Einen weiteren Hinweis auf den kritischen Punkt liefert die Tatsache, dass in diesem

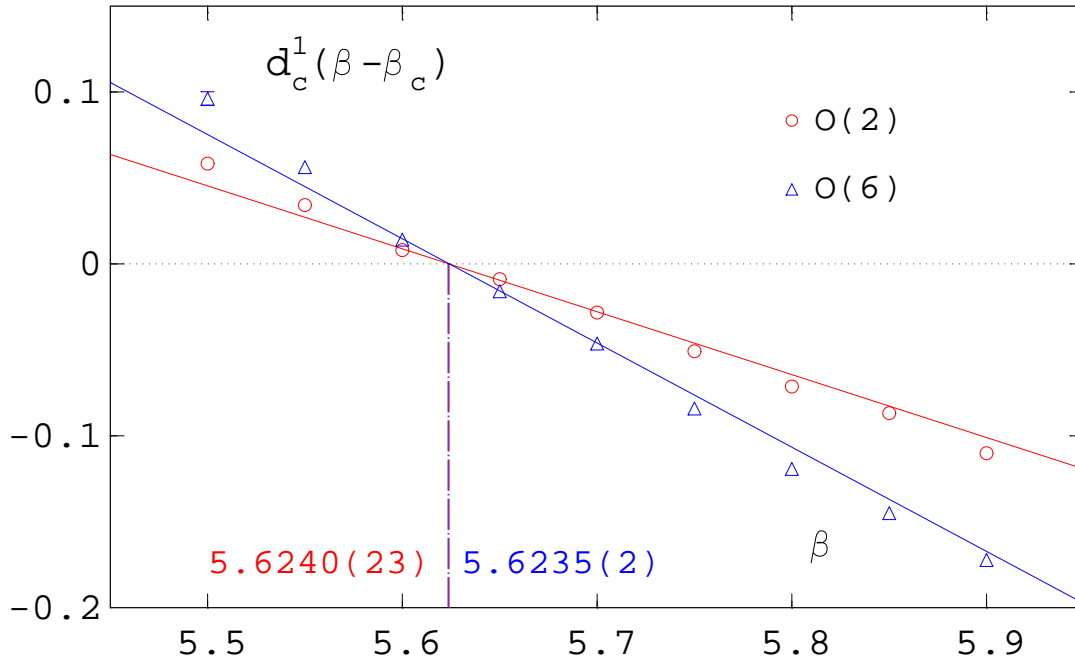


Abbildung 3.5: Die Ergebnisse für $d_c^1(\beta - \beta_c)$ in Abhängigkeit von β für $O(2)$ -Exponenten (blaue Punkte, aus Tabelle 3.3) und $O(6)$ -Exponenten (rote Punkte, aus Tabelle 3.4). Die durchgezogenen Linien sind Geradenfits durch die Werte für $5.6 \leq \beta \leq 5.7$, die gestrichelten Linien markieren die Nullstellen dieser Fits und damit β_c .

Bereich der obige Ansatz die Daten bis zur kleinsten Masse beschreibt, während er bei den anderen Kopplungen nicht so weit hinunter gilt. Das bedeutet, dass hier β_r und damit $\beta - \beta_c$ klein sein muss, denn nur dann gilt der Ansatz auch noch bei kleinen Massen. Je weiter man sich von β_c entfernt, desto größer muss die Masse sein, um in den Bereich kleiner $|z|$ zu kommen.

Betrachtet man den zweiten Fitparameter $d_c^1(\beta - \beta_c)$, so weist dieser zwischen

Exponenten	β_c	d_c^1	$\chi^2/d.o.f.$
$O(2)$	5.6240(23)	-0.366(18)	1.19
$O(6)$	5.6235 (2)	-0.605 (3)	0.01

Tabelle 3.5: Fitergebnisse für die kritische Kopplung β_c über die Nullstelle der Funktion $d_c^1(\beta - \beta_c)$ mit den Daten aus Tabelle 3.3 ($O(2)$ -Exponenten) beziehungsweise 3.4 ($O(6)$ -Exponenten).

$\beta = 5.6$ und $\beta = 5.65$ eine Nullstelle auf, das heißt, in diesem Bereich liegt die kritische Kopplung β_c . Abbildung 3.5 zeigt diese Werte zusammen mit einem Ge-

radenfit durch die drei Werte für $5.6 \leq \beta \leq 5.7$. In Tabelle 3.5 sind die Ergebnisse dieser Geradenfits aufgelistet. Dabei zeigt sich, dass der Fit für die Daten mit $O(6)$ -Exponenten um einiges besser funktioniert als für die Daten mit $O(2)$ -Exponenten. Das kann bei einem Fit mit nur drei Punkten auch Zufall sein. Die Fehler der kritischen Kopplung darf man nicht überbewerten, da die dem Fit zugrunde liegenden Daten schon Ergebnisse eines Fits sind, der selbst nur auf einer Näherung beruht.

3.4 Der Goldstone-Effekt

Wie bei den Spinmodellen sollte es auch bei der aQCD in der chiral gebrochenen Phase einen Goldstone-Effekt geben, das heißt, eine Divergenz der chiralen Suszeptibilität bei verschwindender Quarkmasse $m_q a$. Diese wird hier durch masselose Goldstone-Bosonen, die Pionen, erzeugt. Die Art der Divergenz hängt von der Zahl der Dimensionen ab. Bei einer dreidimensionalen Theorie erwartet man [30, 31]

$$\chi_m \sim (m_q a)^{-1/2} \quad (3.18)$$

und bei einer vierdimensionalen Theorie

$$\chi_m \sim \ln(m_q a). \quad (3.19)$$

Die aQCD ist eigentlich eine vierdimensionale Theorie, aber Fluktuationen in Zeitrichtung werden bei genügend hohen Temperaturen unterdrückt, da die zeitliche Ausdehnung in der Pfadintegralformulierung (Kapitel 1.4) $1/T$ beträgt. Deshalb ist sie für endliche Temperaturen effektiv eine dreidimensionale Theorie. Im folgenden Abschnitt soll nun untersucht werden, welche Art der Divergenz vorliegt und ob diese vielleicht durch den Deconfinement-Phasenübergang beeinflusst wird.

Wir benutzen das chirale Kondensat zum Nachweis des Goldstone-Effektes, weil es allgemein besser zu berechnen ist als die chirale Suszeptibilität, die die Fluktuation des chiralen Kondensats misst. Zudem divergiert sie für verschwindende Masse, wodurch eine genaue Bestimmung erschwert wird, und es wird auch nicht die volle chirale Suszeptibilität berechnet, sondern nur χ_{dis} .

Für kleine Massen erwarten wir bei einer dreidimensionalen Theorie

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle(\beta < \beta_c, m_q a) = \langle \bar{\psi}\psi \rangle(\beta, 0) + c_1(m_q a)^{1/2} + c_2(m_q a), \quad (3.20)$$

wobei wie bei den Spinmodellen (siehe Kapitel 2.4.2) der nächste Term der Entwicklung berücksichtigt wird. Bei einer vierdimensionalen Theorie sollte die Massenabhängigkeit von der Form

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle(\beta < \beta_c, m_q a) = \langle \bar{\psi}\psi \rangle(\beta, 0) + d_1(m_q a \ln(m_q a) - m_q a) \quad (3.21)$$

sein.

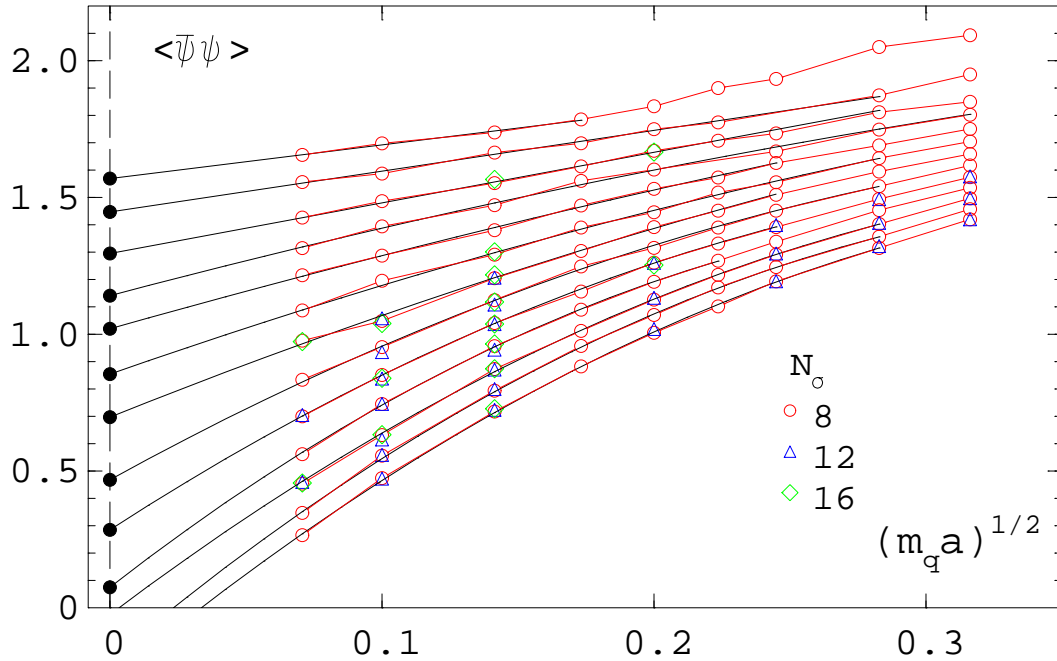


Abbildung 3.6: Das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ für alle β -Werte zwischen 5.3 (oberste Punkte) und 5.9 (unterste Punkte) aufgetragen gegen $(m_q a)^{1/2}$. Die schwarzen Linien sind Fits mit dem Ansatz (3.20), die ausgefüllten schwarzen Kreise zeigen die Extrapolation zu verschwindender Masse.

3.4.1 Der Bereich zwischen T_d und T_c

In Abbildung 3.6 ist das chirale Kondensat für alle β -Werte zwischen $\beta = 5.3$ und $\beta = 5.9$ gegen $(m_q a)^{1/2}$ aufgetragen. Man erkennt deutlich, dass es keinerlei Finite-Size-Effekte gibt, da bis auf kleinere, statistisch bedingte Abweichungen die Werte von Gittern mit verschiedenem N_σ aufeinanderliegen. Dieses weist darauf hin, dass die Korrelationslänge auch bei den kleinsten Massen noch relativ klein ist. Bei den Spinmodellen hingegen (siehe Abbildung 2.6) sind die Finite-Size-Effekte bei vergleichbaren Gittergrößen in der kritischen Region weitaus größer.

Bei der kleinsten Kopplung $\beta = 5.3$ erkennt man bei den höheren Massen (ab etwa $m_q a = 0.04$ beziehungsweise $(m_q a)^{1/2} = 0.2$) ein Abweichen vom Goldstone-Verhalten. Verantwortlich hierfür ist die kritische Linie des Deconfinement-Übergangs. Für kleine Massen dominiert der Goldstone-Effekt, das heißt die Singularität auf der Koexistenzlinie, das Verhalten des chiralen Kondensats. Die weiter entfernte Singularität aufgrund des Deconfinement-Übergangs kann hier nicht gewinnen. Die kritische Kopplung dieses Übergangs steigt aber mit zunehmender Masse an, überquert zwischen $m_q a = 0.04$ und $m_q a = 0.08$ den Wert $\beta = 5.3$ (siehe Abbildung

β	$\langle\bar{\psi}\psi\rangle(\beta, 0)$	c_1	c_2	Fitbereich $m_q a$	$\chi^2/d.o.f.$
5.3	1.569(13)	1.23(12)	-	0.005 - 0.03	0.24
5.35	1.447 (7)	1.49 (4)	-	0.005 - 0.08	1.33
5.4	1.295 (8)	1.85 (4)	-	0.005 - 0.08	0.63
5.45	1.141(11)	2.64(11)	-1.72(25)	0.005 - 0.10	3.03
5.5	1.020(21)	2.81(26)	-1.37(74)	0.005 - 0.06	1.19
5.55	0.854(22)	3.49(22)	-2.48(54)	0.005 - 0.08	2.18
5.6	0.697(24)	3.98(29)	-2.66(84)	0.005 - 0.06	1.67
5.65	0.468(17)	5.48(20)	-5.97(54)	0.005 - 0.08	1.33
5.7	0.285(19)	6.44(22)	-7.83(61)	0.005 - 0.06	1.28
5.75	0.075(22)	7.74(30)	-10.77(96)	0.005 - 0.05	0.61
5.8	-0.025(19)	7.51(19)	-8.71(45)	0.005 - 0.08	1.26
5.85	-0.190(12)	8.39(14)	-10.34(37)	0.005 - 0.08	1.14
5.9	-0.267(10)	8.27(12)	-9.46(31)	0.005 - 0.08	1.97

Tabelle 3.6: Ergebnisse der Fits des Goldstone-Verhaltens mit Gleichung (3.20). Die obere Fitgrenze wird durch das minimal $\chi^2/d.o.f.$ festgelegt.

3.1) und beeinflusst daher in diesem Massenbereich das Verhalten stärker als der Goldstone-Effekt. Die Änderung des Verhaltens des chiralen Kondensats ist auch bei der nächsthöheren Kopplung $\beta = 5.35$ zu beobachten, hier aber erst bei der größten Masse. Bei den höheren Kopplungen geschieht dieses erst bei noch größeren Massen, so dass es in unseren Daten nicht zu sehen ist.

Tabelle 3.6 zeigt die Ergebnisse der Fits mit Gleichung (3.20). Bei den drei kleinsten β -Werten ist der Parameter c_2 innerhalb der Fehler Null, deswegen wird dieser Term weggelassen. Die Fitkurven sind als schwarze Linien in Abbildung 3.6 eingezeichnet. Es fällt auf, dass der Fit bei allen Kopplungen, auch in der chiral restaurierten Phase, ein relativ kleines $\chi^2/d.o.f.$ ergibt, nur die obere Grenze, bei der es minimal wird, variiert etwas. Das kann aber an der jeweiligen Statistik liegen. Der einzige Hinweis auf den Phasenübergang besteht darin, dass die Parameter c_1 und vor allem c_2 sich unterhalb von $\beta = 5.6$ nur langsam verändern, bei $\beta = 5.65$ aber sprunghaft ansteigen. Die plötzlich verstärkte Krümmung c_2 entspricht dem Übergang vom $(m_q a)^{1/2}$ - zu $(m_q a)^{1/\delta}$ -Verhalten, also von Gleichung 3.20 zu 3.13.

Betrachtet man die Extrapolation zu $m_q a = 0$, die in Abbildung 3.6 durch die ausgefüllten Kreise markiert sind, so bestätigt sich das Ergebnis aus [1], dass diese erst bei $\beta_c \approx 5.8$ den Wert Null erreichen. Da es aber in der chiral restaurierten Phase kein Goldstone-Verhalten gibt und das chirale Kondensat bei $m_q a = 0$ verschwinden muss, haben die Fits hier keinen physikalischen Hintergrund. Besonders deutlich wird dies bei $\beta > 5.8$, wo das $\chi^2/d.o.f.$ ebenfalls klein ist, die Extrapolationen aber einen unphysikalischen negativen Wert ergeben.

Zusammenfassend kann man also sagen, dass das Goldstone-Verhalten für drei Dimensionen unterhalb von T_c in $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ explizit bestätigt wird. In der Nähe von T_c

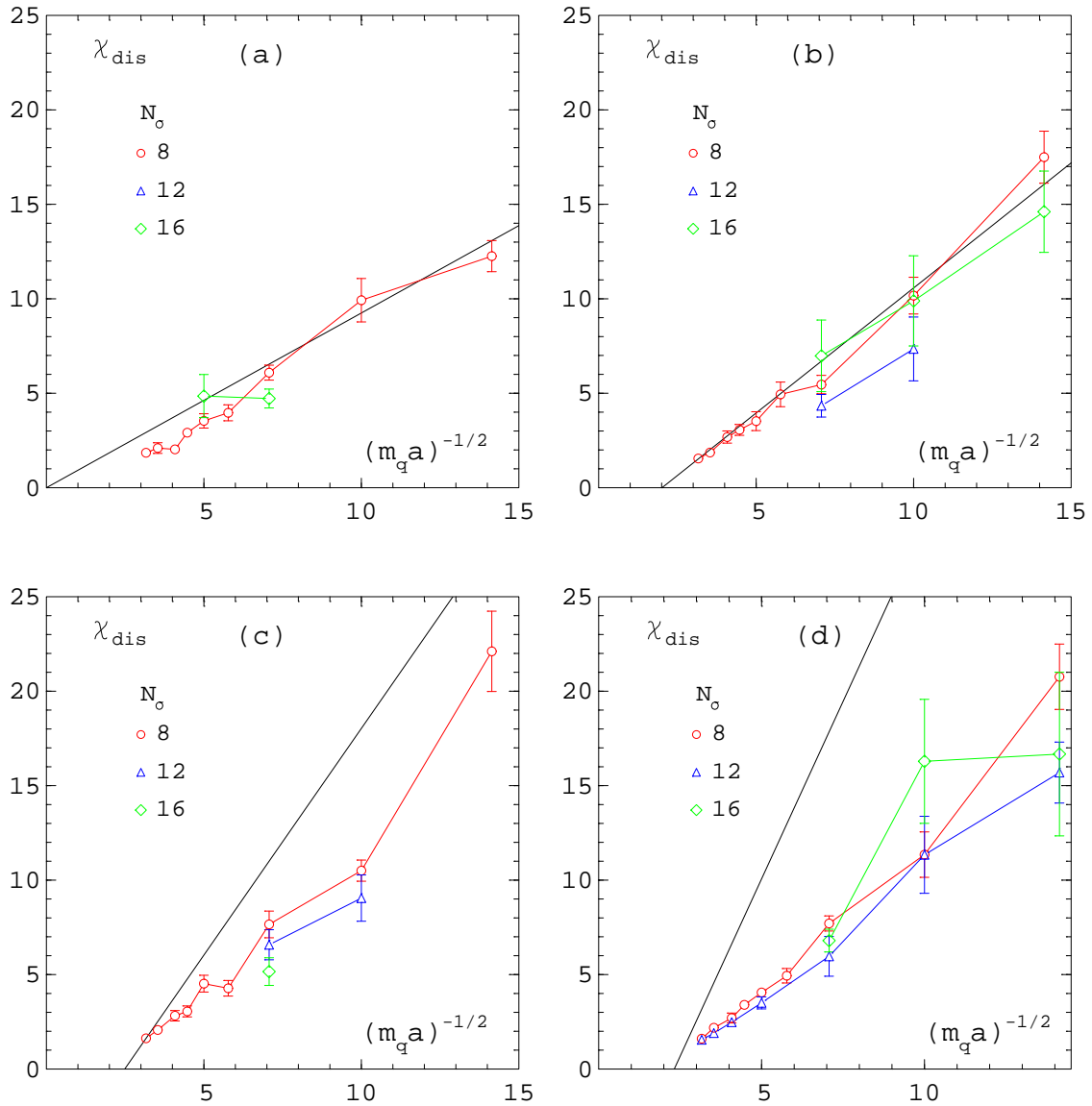


Abbildung 3.7: Die chirale Suszeptibilität χ_{dis} aufgetragen gegen $(m_q a)^{-1/2}$ für $\beta = 5.4$ (a), $\beta = 5.6$ (b), $\beta = 5.65$ (c) und $\beta = 5.8$ (d). Die schwarzen Linien entsprechen dem Ansatz (3.22) mit den Parametern aus Tabelle 3.6.

zeigen die $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ -Daten eine Krümmung, die auf das einsetzende kritische Verhalten zurückzuführen ist. Fits mit dem Ansatz (3.20) erlauben daher keine genaue Bestimmung des kritischen Punktes, liefern aber eine obere Schranke für T_c .

Die Fits mit Gleichung (3.21) werden hier nicht gezeigt, da bei ihnen $\chi^2/d.o.f.$ ausnahmslos um den Faktor 10-50 höher ist und die Kurven optisch nicht gut zu den Daten passen. Die aQCD bei endlicher Temperatur verhält sich also nicht wie ein effektives vierdimensionales Spinmodell.

Die Abbildung 3.7 zeigt für einige β -Werte die Größe χ_{dis} . Auch hier ist keine echter Finite-Size-Effekt zu sehen. Zwar weichen die Werte der verschiedenen Gitter teilweise stark voneinander ab, aber diese Abweichungen lassen weder eine einheitliche Richtung erkennen noch paßt die Reihenfolge der Gitter. Daher hängen diese Abweichungen wahrscheinlich eher mit der geringeren Statistik bei den größeren Gitter zusammen.

Das zu Gleichung (3.20) äquivalente Goldstone-Verhalten

$$\chi_m(\beta < \beta_c, m_q a) = c_2 + \frac{c_1}{2}(m_q a)^{-1/2} \quad (3.22)$$

mit den Werten aus Tabelle 3.6 für die Parameter c_1 und c_2 ist ebenfalls eingezeichnet. Es zeigt sich, dass in der chirale gebrochenen Phase (Abbildungen 3.21 (a) und (b)) die Fits gut zu den Werten passen. Hier ist also χ_{dis} eine gute Approximation der chiralen Suszeptibilität χ_m .

Anders ist die Situation in der chirale restaurierten Phase (Abbildungen 3.21 (c) und (d)), wo weder die Steigung noch der y-Achsen-Abschnitt zu den Daten passen. dafür ist vor allem die Tatsache verantwortlich, dass der Ansätze (3.20) beziehungsweise (3.22) hier nicht mehr gelten. Die Diskrepanz zwischen den Daten und dem Fit ist aber zu groß, um sie nur dadurch zu erklären. Möglicherweise spielt hier auch der nicht berücksichtigte Term χ_{conn} (siehe Gleichung 1.52) eine Rolle.

In [47] wurde für die fundamentale QCD mit zwei Quark-Flavours der Einfluss des zusammenhängenden Anteils χ_{conn} in der Nähe des pseudokritischen Punktes für verschiedene Massen untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass in der chirale restaurierten Phase χ_{conn} sogar größer als χ_{dis} ist und sie in der gebrochenen Phase nahezu gleich groß sind. Direkt am Phasenübergang trägt χ_{conn} bei der kleinsten untersuchten Masse $m_q a = 0.02$ noch 30% zu χ_m bei, bei größeren Massen noch mehr. Insofern ist es überraschend, dass in der aQCD die Übereinstimmung zwischen χ_m und χ_{dis} in der gebrochenen Phase so gut ist.

3.4.2 Temperaturen unterhalb T_d

Abbildung 3.8 zeigt die Ergebnisse der Simulationen bei Temperaturen unterhalb des Deconfinement-Phasenübergangs, in (a) aufgetragen gegen $(m_q a)^{1/2}$, in (b) gegen $(m_q a)(\ln(m_q a) - 1)$. Aufgrund der Nähe zum Deconfinement-Phasenübergang

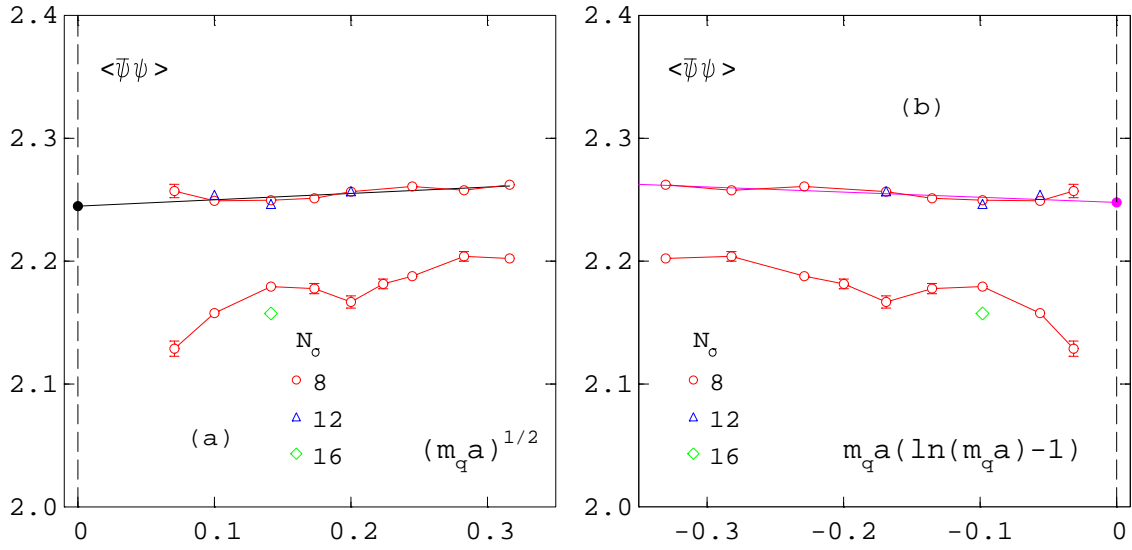


Abbildung 3.8: (a) Das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ für $\beta = 5.1$ (obere Punkte) und $\beta = 5.2$ (untere Punkte) aufgetragen gegen $(m_q a)^{1/2}$ (a) und $m_q a (\ln(m_q a) - 1)$ (b). Die schwarze Linie entspricht dem Fit mit dem Ansatz (3.20), die pinkfarbene dem Fit mit dem Ansatz (3.21). Die ausgefüllten Punkte bezeichnen die Extrapolation zu verschwindender Masse.

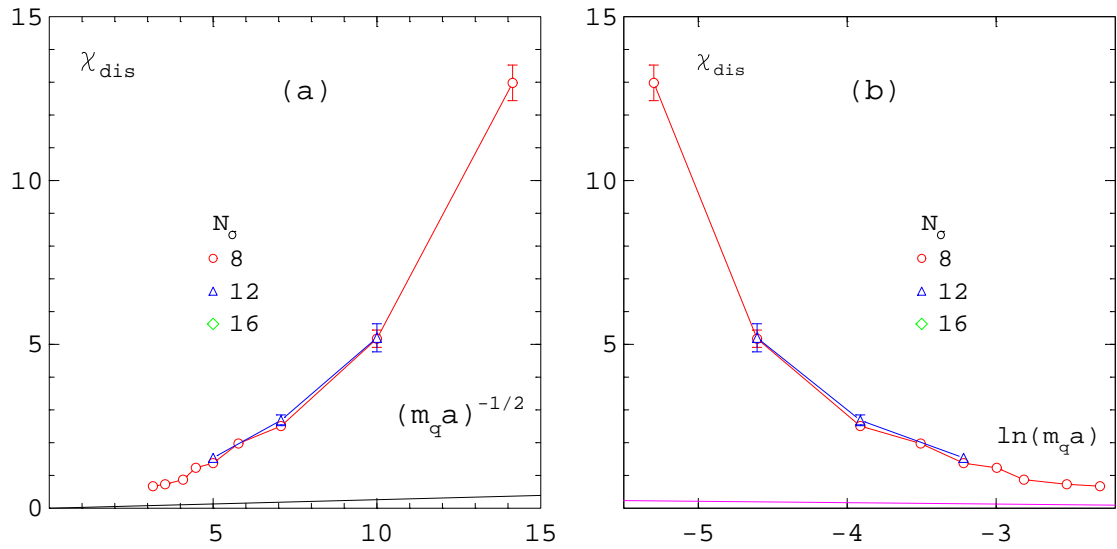


Abbildung 3.9: χ_{dis} für $\beta = 5.1$ aufgetragen gegen $(m_q a)^{-1/2}$ (a) und $\ln(m_q a)$ (b). Die schwarze Linie entspricht dem Ansatz 3.22, die pinkfarbene Linie dem Ansatz $\chi_m = d_1 \ln(m_q a)$ mit den Parametern aus Tabelle 3.7.

$\langle\bar{\psi}\psi\rangle(\beta, 0)$	c_1	d_1	Fitbereich $m_q a$	$\chi^2/d.o.f.$	Ansatz
2.2448(27)	0.052(11)		0.005 - 0.1	1.53	(3.20)
2.2478(34)		-0.042(26)	0.005 - 0.1	1.50	(3.21)

Tabelle 3.7: Ergebnisse der Fits des Goldstone-Verhaltens mit den Ansätzen (3.20) und (3.21) für $\beta = 5.1$.

schwanken die Ergebnisse bei $\beta = 5.2$ stark, so dass man ein Goldstone-Verhalten nicht erkennen kann. Hier ist auch bei $m_q a = 0.02$ zum ersten Mal ein Finite-Size-Effekt zu beobachten. Bei $\beta = 5.1$ hingegen ist das chirale Kondensat nahezu unabhängig von der Masse $m_q a$, und es gibt auch keinen systematischen Finite-Size-Effekt.

In Tabelle 3.7 sind die Ergebnisse der Fits mit dem dreidimensionalen (3.20) und dem vierdimensionalen (3.21) Ansatz bei $\beta = 5.1$ aufgeführt, wobei im ersten Fall der Parameter c_2 auf Null gesetzt wurde, da er schon bei den größeren Kopplungen nicht mehr benötigt wurde. Die Fitkurven sind auch in der Abbildung eingezeichnet. Man erhält mit beiden Ansätzen ein kleines $\chi^2/d.o.f.$, wobei die Parameter c_1 beziehungsweise d_1 fast mit Null verträglich sind, da sich das chirale Kondensat mit der Masse nur sehr gering ändert. Um zu unterscheiden, welcher Ansatz hier der Richtige ist, braucht man sehr viel genauere Simulationen bei kleineren Massen.

Abbildung 3.9 zeigt χ_{dis} für die beiden β -Werte. Die Massenabhängigkeit dieser Größe passt offensichtlich überhaupt nicht zur Ableitung des chiralen Kondensates (schwarze beziehungsweise pinkfarbene Linien), so dass in diesem Bereich χ_{dis} nur eine schlechte Approximation der Suszeptibilität χ_m darstellt.

Die Diskrepanz zwischen χ_{dis} und χ_m oberhalb kann hier auch nicht einfach durch das Fehlen des Anteils von χ_{conn} erklärt werden, da man ein negatives χ_{conn} bräuchte. Hier dürfte eher die Nähe zum Deconfinement-Phasenübergang eine Rolle spielen, der die Suszeptibilität stärker beeinflusst als das chirale Kondensat.

3.5 Kritisches Verhalten auf der Koexistenzlinie

Da wir eine Schätzung für die kritische Kopplung haben und aus dem Goldstone-Verhalten das chirale Kondensat bei verschwindender Masse extrapoliert haben, können wir auch das Skalenverhalten entlang der Koexistenzlinie überprüfen. Man erwartet dort das Verhalten

$$\langle\bar{\psi}\psi\rangle(\beta < \beta_c, m_q a = 0) = B(\beta_c - \beta)^{\beta_e}. \quad (3.23)$$

Abbildung 3.10 zeigt die zu $m_q a = 0$ extrapolierten Werte des chiralen Kondensates aus Tabelle 3.6 in Abhängigkeit von $\beta_c - \beta$. Schon beim ersten Blick fällt auf, dass

Fitbereich $\beta_c - \beta$	β_e	B	b_1	b_2	$\chi^2/d.o.f.$
0.0240 - 0.3240	$O(2)$	2.223 (7)	-	-	19.75
0.0240 - 0.3240	$O(2)$	1.853 (55)	0.41 (7)	-	17.18
0.0240 - 0.3240	$O(2)$	3.042(163)	-1.63(16)	2.17(17)	2.67
0.0235 - 0.3235	$O(6)$	2.489 (8)	-	-	15.88
0.0235 - 0.3235	$O(6)$	2.483 (65)	0.01 (5)	-	19.05
0.0235 - 0.3235	$O(6)$	4.201 (20)	-1.92(13)	2.18(15)	4.08
0.0235 - 0.3235	0.404(10)	2.416 (37)	-	-	18.36
0.0240 - 0.1740	$O(2)$	2.122 (17)	-	-	8.67
0.0240 - 0.1740	$O(2)$	2.512(103)	-0.41 (9)	-	5.67
0.0240 - 0.1740	$O(2)$	3.473(324)	-2.21(42)	3.04(71)	1.54
0.0235 - 0.1735	$O(6)$	2.460 (20)	-	-	25.95
0.0235 - 0.1735	$O(6)$	3.448(130)	-0.74 (7)	-	9.35
0.0235 - 0.1735	$O(6)$	5.040(413)	-2.66(32)	3.37(57)	2.20
0.0235 - 0.1735	0.270(17)	1.817 (62)	-	-	3.68
0.0740 - 0.1740	$O(2)$	2.104 (17)	-	-	0.75
0.0740 - 0.1740	$O(2)$	2.159(147)	-0.07(17)	-	0.008
0.0735 - 0.1735	$O(6)$	2.432 (20)	-	-	4.10
0.0735 - 0.1735	$O(6)$	2.933(176)	-0.44(13)	-	0.007
0.0735 - 0.1735	0.336(30)	2.057(120)	-	-	0.012

Tabelle 3.8: Ergebnisse der Fits des chiralen Kondensates bei $m_q a = 0$ (aus Tabelle 3.6) mit den Ansätzen (3.23) beziehungsweise (3.24). Bei den Fits mit $O(2)$ - und $O(6)$ -Exponent wurde das entsprechende β_c aus Tabelle 3.5 benutzt, bei den freien Fits $\beta_c = 5.6235$.

die Daten eher zu einer Geraden als zu einer Exponentialfunktion passen, der Ansatz (3.23) also nicht ausreichen wird. Man muss also noch zusätzliche Korrekturen zum Skalenverhalten berücksichtigen. Dieses erreicht man mit dem Ansatz

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle (\beta < \beta_c, m_q a = 0) = B(\beta_c - \beta)^{\beta_e} [1 + b_1(\beta_c - \beta)^{\omega\nu} + b_2(\beta_c - \beta)], \quad (3.24)$$

der die führenden nicht-analytischen (proportional zu $(\beta_c - \beta)^{\omega\nu}$) und analytischen (proportional zu $\beta_c - \beta$) Korrekturen enthält.

Tabelle 3.8 zeigt die Ergebnisse der Fits mit $O(6)$ -, $O(2)$ - und freiem β_e -Exponenten und mit jeweils drei verschiedenen Fitbereichen ($5.3 \leq \beta \leq 5.6$, $5.45 \leq \beta \leq 5.6$ und $5.45 \leq \beta \leq 5.55$). Es werden sukzessive Korrekturterme hinzugefügt, wobei $\omega\nu = 0.5$ benutzt wird. Fits mit freiem β_e -Exponenten und Korrekturtermen werden allerdings nicht aufgeführt, weil dann die Fits zu instabil und die Fehler größer als die Fitparameter werden.

Bei dem größten Fitbereich, der alle Punkte zwischen β_c und β_d umfasst, braucht man schon beide Korrekturterme, um ein einigermaßen niedriges $\chi^2/d.o.f.$ zu be-

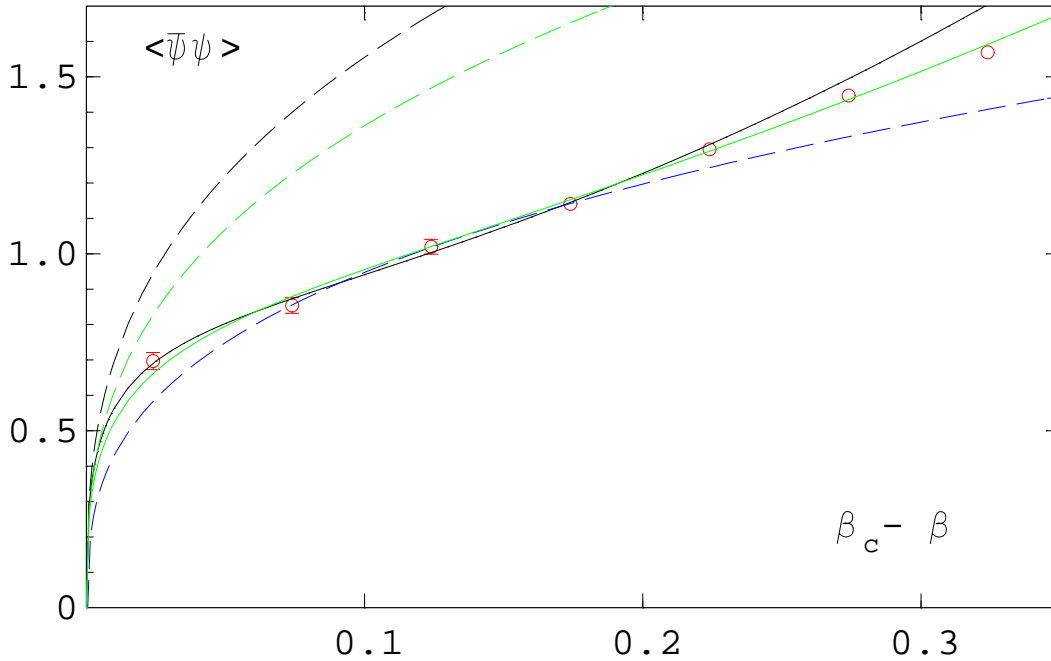


Abbildung 3.10: Das chirale Kondensat auf der Koexistenzlinie, mit $\beta_c = 5.6240$. Die durchgezogenen Linien sind die für den jeweiligen Fitbereich besten Fits mit dem Ansatz (3.24), die gestrichelten Linien zeigen nur die führenden Terme dieser Fits. Der grüne Fit beinhaltet alle sieben Punkte, der schwarze nur die ersten vier. Auffällig ist der große Unterschied zwischen dem führenden Term und den Datenpunkten. Der blaue Fit beinhaltet nur den zweiten bis vierten Punkt. Hier sind keine Korrekturterme notwendig.

kommen. Der besten Fit erhält man mit dem $O(2)$ -Wert für β_e . Dieser Fit sowie dessen führender Term sind in Abbildung 3.10 grün eingezeichnet. Man sieht, dass der Fit nur große Korrekturanteile enthält, der führende Term liegt weit von allen Datenpunkten entfernt. Nimmt man β_e als freien Fitparameter, erhält man einen Wert nahe 0.425, dem Wert von $O(6)$, aber mit großen $\chi^2/d.o.f.$.

Verkleinert man den Fitbereich auf die ersten vier Punkte, werden die Fits im Allgemeinen etwas besser, trotzdem braucht man mit $O(2)$ - oder $O(6)$ -Exponenten immer noch beide Korrekturterme. Wiederum funktioniert der Fit mit $O(2)$ -Exponenten besser, er ist auch in Abbildung 3.10 eingezeichnet (schwarze Kurven). hier ist der Unterschied zwischen dem führenden Term und den Datenpunkten sogar noch größer als bei dem Fit mit allen sieben Punkten. Der freie Fit ergibt ein kleines β_e bei einem moderaten $\chi^2/d.o.f.$.

Die Fits werden besser, wenn man zusätzlich noch den ersten Punkt ($\beta = 5.6$) herausschließt. Der Fit mit $O(2)$ -Exponenten funktioniert dann sogar ohne Korrekturen, und der freie Fit ergibt ebenfalls ein β_e nahe dem $O(2)$ -Wert 0.349. Man kann die-

ses Ergebnis dadurch verstehen, dass bei $\beta = 5.6$ der Goldstone-Ansatz 3.20 nicht nur noch für sehr kleine Massen gilt, da man der kritischen Kopplung zu nahe ist. Schliesslich muss das $(m_q a)^{1/2}$ -Verhalten bei Annäherung an β_c irgendwann in das $(m_q a)^{1/\delta}$ -Verhalten auf der kritischen Isotherme übergehen. Die Fits mit dem Ansatz (3.17) im vorigen Abschnitt weisen ebenfalls darauf hin, dass die Daten bei $\beta = 5.6$ genauso gut durch das kritische Verhalten beschrieben werden können.

Andererseits kann man die Fits aus dem vorigen Abschnitt aber auch so deuten, dass die kritische Region des Phasenübergangs, also der Bereich, in dem die Potenzansätze mit den kritischen Exponenten gelten, nur bis zu einem β -Wert zwischen 5.6 und 5.55 reicht. Das heißt, dass der Ansatz (3.23) auch nur bis dahin gültig ist, und die Fits nur zufällig so gut funktionieren. Dieses würde erklären, warum man die Korrekturterme benötigt, um die Punkte von kleineren β -Werten mit zu fitten. Allerdings wäre es dann schön, wenn der führende Term wenigstens noch durch den Punkt bei $\beta = 5.6$ ginge.

Nimmt man an, dass die erste Erklärung richtig ist, kann man aus diesen Fits den Wert der kritischen Amplitude B abschätzen. Da der Korrekturterm bei $O(2)$ -Exponenten nicht benötigt wird, ist hier $B = 2.10(2)$ eine gute Schätzung. Bei $O(6)$ -Exponenten bringt der Korrekturterm zwar eine Verbesserung des Fits, aber gleichzeitig wird die Amplitude so groß, dass der führende Term weit oberhalb der Datenpunkte verläuft. Deshalb ist auch hier der Wert $B = 2.43(2)$ aus dem Fit ohne Korrekturterme eher akzeptabel.

3.6 Skalenfunktionen

Die Untersuchungen in den vorhergehenden Abschnitten haben ergeben, dass die Daten sowohl mit $O(2)$ - als auch $O(6)$ -Exponenten verträglich sind, wobei die Fits mit den $O(2)$ -Exponenten im Allgemeinen etwas besser funktionieren. Ein weiteres Vergleichskriterium mit den Spinmodellen ist die Skalenfunktion des chiralen Kondensats $f_{\bar{\psi}\psi} = \langle \bar{\psi}\psi \rangle m^{-1/\delta}$, die der magnetische Skalenfunktion $f_G = Mh^{-1/\delta}$ bei den Spinmodellen entspricht.

In den Abbildungen 3.11 und 3.13 ist daher $\langle \bar{\psi}\psi \rangle m^{-1/\delta}$ gegen $z = \beta_r/m^{-1/\Delta}$ aufgetragen, erstere mit $O(2)$ -Exponenten und den korrespondierenden Normierungs-

Exponenten	B	β_0	d_c	$(m_q a)_0$
$O(2)$	2.10(2)	0.119(3)	2.66(1)	0.0093(2)
$O(6)$	2.43(2)	0.124(2)	2.67(3)	0.0091(5)

Tabelle 3.9: Werte für die Normierungskonstanten, die für die Skalenfunktion benutzt werden.

konstanten, letztere mit den entsprechenden $O(6)$ -Größen. Es sind nur Daten aus dem Bereich $5.3 \leq \beta \leq 5.9$ eingezeichnet, und bei $\beta = 5.3$ sind nur Daten mit $m_q a \leq 0.03$ berücksichtigt. Bei $\beta < 5.3$ und bei den höheren Massen bei $\beta = 5.3$ wird das Skalenverhalten durch den Deconfinement-Phasenübergang gestört, und die Kopplungen $\beta = 6.2$ und $\beta = 6.5$ sind zu weit vom kritischen Punkt entfernt und skalieren nicht mehr (siehe dazu nächstes Kapitel).

Die Normierungskonstanten hängen über $\beta_0 = B^{-1/\beta}$ und $(m_q a)_0 = d_c^{-\delta}$ mit den Amplituden des kritischen Verhaltens auf der kritischen Isotherme und der Koexistenzlinie zusammen. Die Werte sind in Tabelle 3.9 zusammengefasst.

Wie man sieht, skalieren die Daten mit $O(2)$ -Exponenten für kleine $|z|$ sehr gut und stimmt dort auch mit der Skalenfunktion des $O(2)$ -Spinmodells überein. Bei $z < 0$ laufen die Daten der verschiedenen β -Werte nach und nach auseinander, wobei sie um so länger bei der Skalenfunktion bleiben, je größer β ist. Den gleichen Effekt gibt es bei den Spinmodellen (siehe Abbildung 3.12). Er wird von nicht-universellen Skalenkorrekturen hervorgerufen. Mit dem allgemeineren Ansatz

$$Mh^{-1/\delta} = \Psi(z, h^{\omega\nu_c}) = f_G(z) + h^{\omega\nu_c} f_G^{(1)}(z) + h^{2\omega\nu_c} f_G^{(2)}(z) + \dots \quad (3.25)$$

kann man aus den Daten die universelle Skalenfunktion $f_G(z)$ extrapolieren, wie dies auch bei den Spinmodellen gemacht wurde. Eine solche Extrapolation könnte man prinzipiell auch mit den aQCD-Daten durchführen, allerdings reichen dafür in diesem Fall die Daten nicht aus, und eine Ferrenberg-Swendsen-Interpolation bei konstantem β ist leider nicht möglich.

Bei $z > 0$ skalieren nur die Punkte zur kleinsten Masse $m_q a = 0.005$ nicht. Möglicherweise gibt es dort doch noch Finite-Size-Effekte. Die bei dieser Masse simulierten $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitter zeigen zwar keine signifikante Abweichung von den $8^3 \times 4$ -Gittern, haben aber nur eine sehr geringe Statistik, so dass man dies nicht ausschließen kann.

Ab $z \approx 1$ weicht die Kurve der aQCD von der $O(2)$ -Skalenfunktion ab. Die Daten von verschiedenen Kopplungen scheinen aber noch zu skalieren, so dass dieses nicht einfach mit Skalenkorrekturen zu erklären ist. Der Grund für diese Abweichung ist unklar, vielleicht spielt hier die Abhängigkeit der Gitterkonstante (und damit der Temperatur) von der Masse eine Rolle.

Mit $O(6)$ -Exponenten skalieren die Daten weniger gut. Vor allem nahe des kritischen Punktes bei $z = 0$, wo man das Skalenverhalten erwarten würde, skalieren die Daten nicht. Erst wenn man sich weiter vom kritischen Punkt entfernt, scheinen die Daten zu skalieren. Auch weichen die Daten vor allem bei $z > 0$ stark von der $O(6)$ -Skalenfunktion ab. Bei $z < 0$ ist die Abweichung zwar kleiner, der Verlauf der Daten passt nicht zu der Skalenfunktion.

Die Ableitung der Skalenfunktion bei $z = 0$ kann man noch genauer betrachten. Dieser Wert kann direkt aus der Zustandsgleichung der Spinmodelle berechnet werden. Bei $z = 0$ (beziehungsweise $x = 0$ in der Widom-Griffith-Form der Zustandsgleichung) befindet man sich noch im Gültigkeitsbereich der Parametrisierung x_s (siehe Gleichung (2.28)). Diesen Ansatz kann man über die Beziehung (2.26) in eine Gleichung

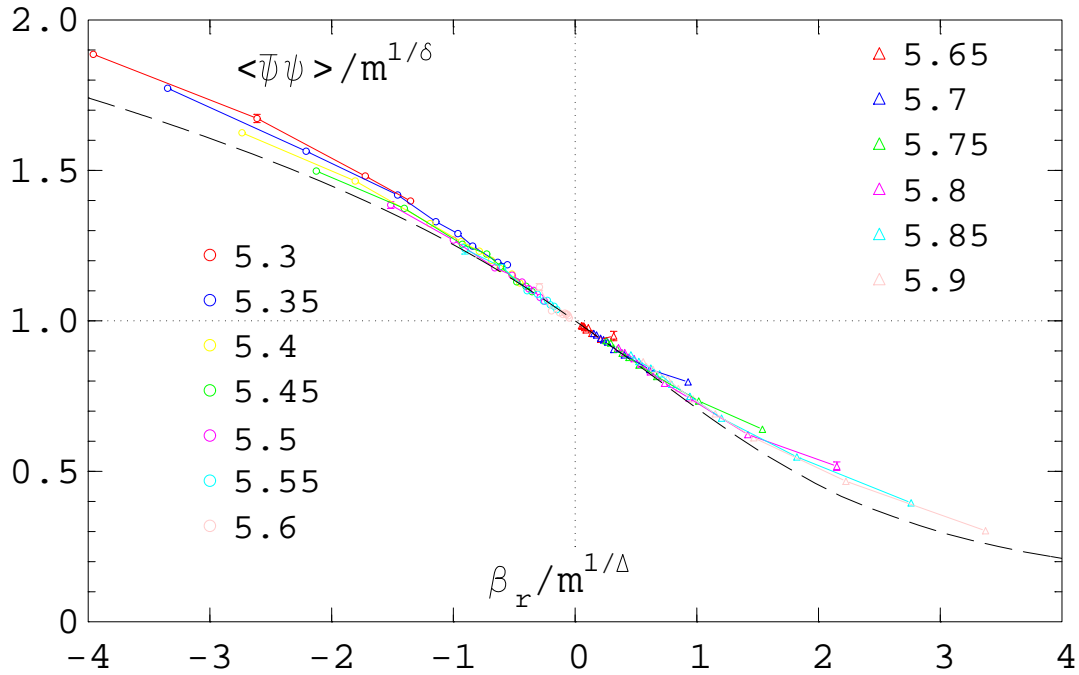


Abbildung 3.11: $\langle \bar{\psi} \psi \rangle / m^{1/\delta}$ aufgetragen gegen $z = \beta_r / m^{1/\Delta}$ mit $O(2)$ -Exponenten und den Normierungskonstanten $\beta_0 = 0.119$ und $(m_q a)_0 = 0.0093$. Die gestrichelte schwarze Linie zeigt die $O(2)$ -Skalenfunktion $f_G(z)$ aus Referenz [35] (siehe auch Abbildung 2.1).

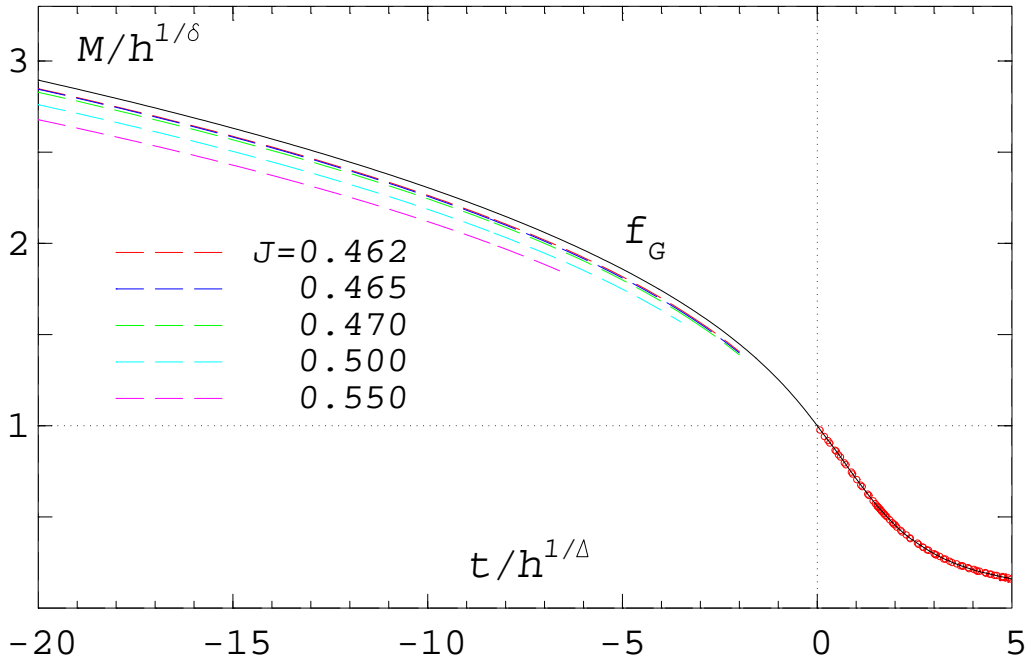


Abbildung 3.12: Die Skalenfunktion $f_G(z)$ des $O(2)$ -Spinmodells aus Referenz [35] mit Ferrenberg-Swendsen-Interpolationen der Daten bei festen $J > J_c$ (gestrichelte Linien) und Datenpunkten bei $J < J_c$ (rote Kreise).

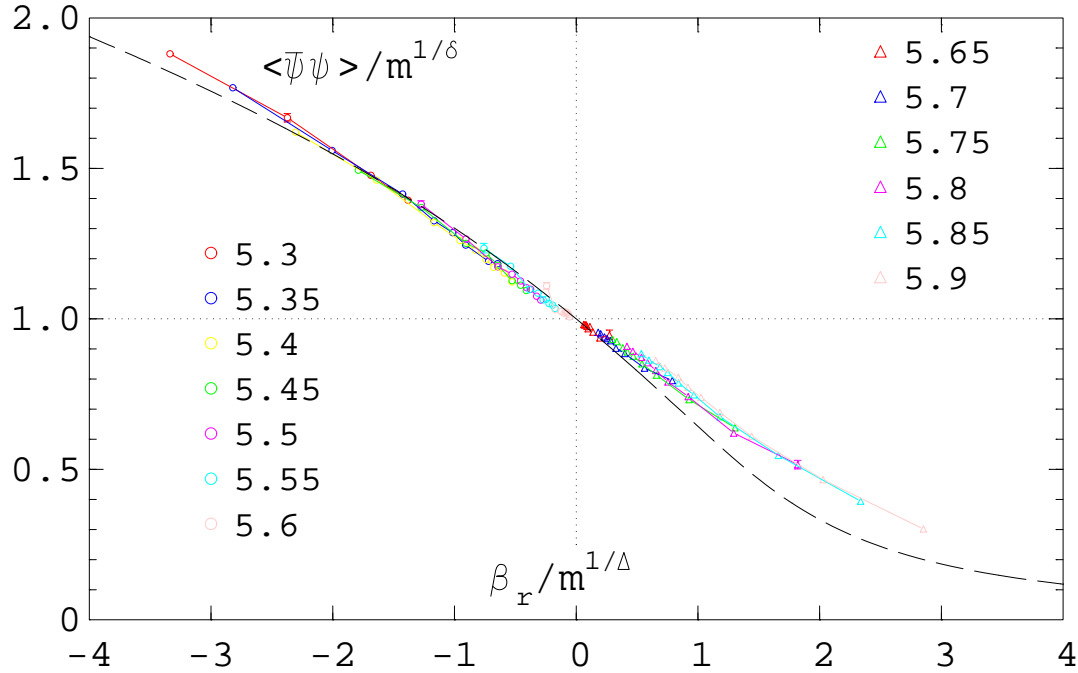


Abbildung 3.13: $\langle \bar{\psi} \psi \rangle / m^{1/\delta}$ aufgetragen gegen $z = \beta_r / m^{1/\Delta}$ mit $O(6)$ -Exponenten und den Normierungskonstanten $\beta_0 = 0.124$ und $(m_q a)_0 = 0.0091$. Die gestrichelte schwarze Linie zeigt die $O(6)$ -Skalenfunktion $f_G(z)$ aus Referenz [38] (siehe auch Abbildung 2.1).

chung in z und f_G umwandeln

$$z f_G^{-1/\beta} + 1 = (\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3) f_G^{-\delta} + \tilde{c}_2 f_G^{-\delta/2} + \tilde{d}_2 f_G^{-3\delta/2}. \quad (3.26)$$

Wenn man diese Gleichung nach z auflöst und dann nach f_G ableitet, erhält man

$$\frac{\partial z}{\partial f_G} = \frac{1}{\beta f_G} z - \delta f_G^{1/\beta} \left[(\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3) f_G^{-\delta-1} + \frac{\tilde{c}_2}{2} f_G^{-\delta/2-1} + \frac{3\tilde{d}_2}{2} f_G^{-3\delta/2-1} \right]. \quad (3.27)$$

Die Ableitung der Skalenfunktion für verschwindendes z ergibt sich dann als Inverse der obigen Ableitung an der Stelle $f_G(z=0) = 1$

$$\begin{aligned} f'_G(0) &= \left(\frac{\partial z}{\partial f_G} \right)^{-1} (0) = - \frac{1}{\delta(\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3 + \frac{\tilde{c}_2}{2} + \frac{3\tilde{d}_2}{2})} \\ &= - \frac{1}{\delta(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}(\tilde{c}_1 + \tilde{d}_3) - \tilde{c}_2)} \\ &= \begin{cases} -0.286(10) & O(2) \\ -0.332(29) & O(6) \end{cases}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

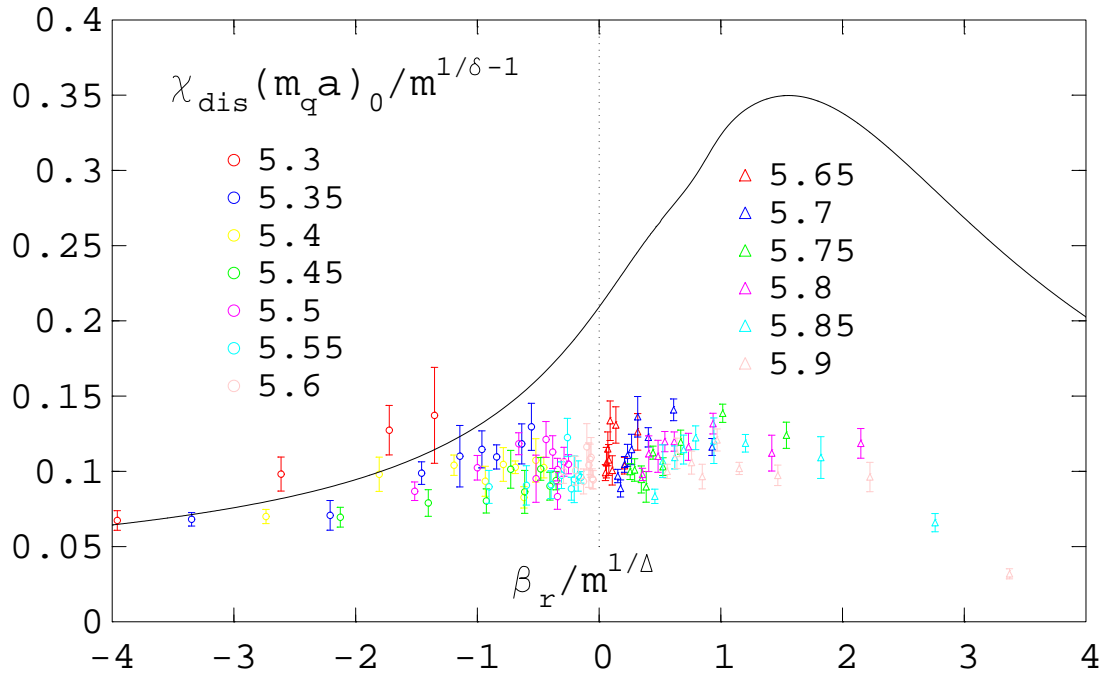


Abbildung 3.14: $\chi_{dis}(m_q a)_0/m^{1/\delta-1}$ aufgetragen gegen $z = \beta_r/m^{1/\Delta}$ mit $O(2)$ -Exponenten und den Normierungskonstanten $\beta_0 = 0.119$ und $(m_q a)_0 = 0.0093$. Die schwarze Linie zeigt die $O(2)$ -Skalenfunktion $f_\chi(z)$ aus Referenz [35] (siehe auch Abbildung 2.2).

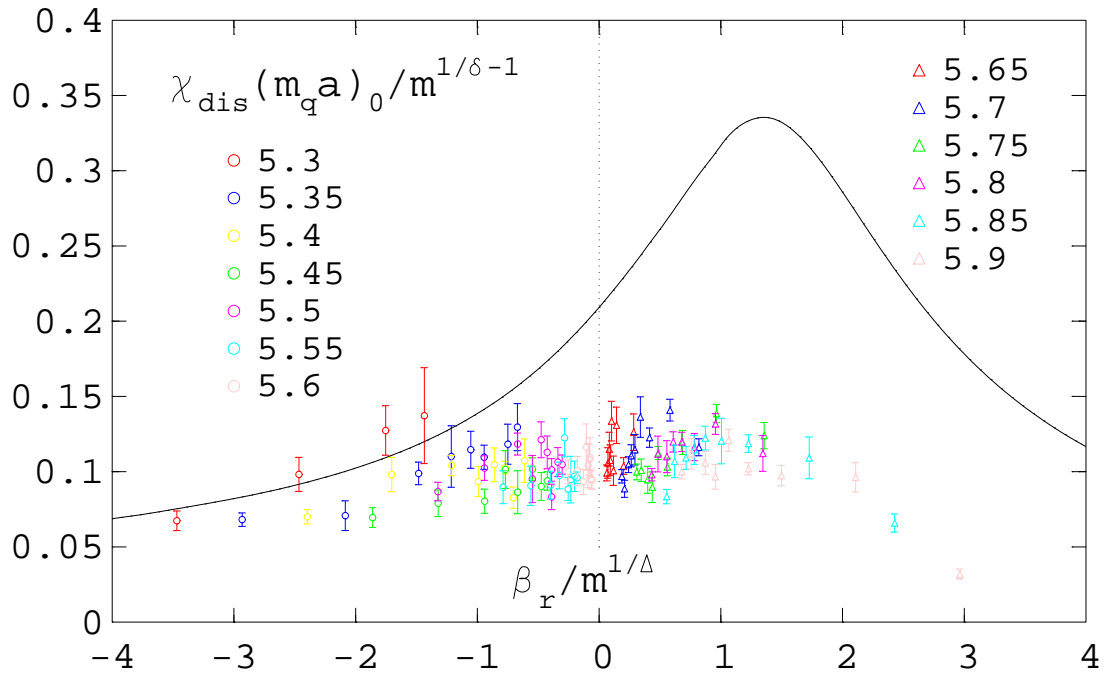


Abbildung 3.15: $\chi_{dis}(m_q a)_0/m^{1/\delta-1}$ aufgetragen gegen $z = \beta_r/m^{1/\Delta}$ mit $O(6)$ -Exponenten und den Normierungskonstanten $\beta_0 = 0.124$ und $(m_q a)_0 = 0.0091$. Die schwarze Linie zeigt die $O(6)$ -Skalenfunktion $f_\chi(z)$ aus Referenz [38] (siehe auch Abbildung 2.2).

Diese Größe kann man für die aQCD aus dem Fitparameter d_c^1 des Ansatzes (3.17) berechnen

$$\begin{aligned} f_{\psi\psi}'(0) &= d_c^1 B^{-1/\beta} d_c^{(1/\beta-1)} \\ &= \begin{cases} -0.271(15) & O(2)\text{-Exponenten} \\ -0.283(7) & O(6)\text{-Exponenten} \end{cases}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Auch hier ist die Übereinstimmung mit dem $O(2)$ -Spinmodell besser als mit dem $O(6)$ -Spinmodell. Es zeigt sich aber auch, dass die Fits auf der Koexistenzlinie mit dem Ansatz (3.24), die größere Werte von B ergeben, wahrscheinlich falsch sind, da dort die Amplitude B meistens grösser ist bei den Fits ohne Korrekturen. Ein größeres B würde aber zu einem kleineren $f_{\psi\psi}'(0)$ führen, also zu einer schlechteren Übereinstimmung mit den Spinmodellen führen.

Die Abbildungen 3.14 und 3.15 zeigen das Skalenverhalten der chiralen Suszeptibilität mit $O(2)$ - und $O(6)$ -Exponenten. Es ist kein einheitliches Skalenverhalten zu erkennen, und nur für $z \lesssim -1$ ist eine gewisse Übereinstimmung mit den entsprechenden $O(N)$ -Skalenfunktionen zu erkennen. Letzteres ist wohl dadurch zu erklären, dass nur der nichtzusammenhängende Anteil χ_{dis} und nicht die volle Suszeptibilität berechnet wird.

3.7 Massenabhängigkeit bei $T > T_c$

Abbildung 3.16 (a) zeigt einen Ausschnitt der Abbildung 3.11 für $z > 1$, wobei hier zusätzlich die Ergebnisse für die beiden Kopplungen $\beta = 6.2$ und $\beta = 6.5$ eingezeichnet sind. Man sieht deutlich, dass diese Kopplungen nicht mehr skalieren, sie liegen also außerhalb der Skalenregion. Aber ihre Kurven zeigen dennoch ein ähnliches Verhalten wie die Skalenfunktion, sie sind nur nach oben verschoben. Daher kann man wahrscheinlich auch hier noch das Skalenverhalten zur Beschreibung der

β	$e_0(\beta)$	$e_1(\beta)$	d_c	$d_c^1(\beta - \beta_c)$	Fitbereich $m_q a$	$\chi^2/d.o.f.$
6.2	25.07(21)	-168.8(59)	-	-	0.01 - 0.04	3.5
6.2	-	-	2.697 (8)	-0.185 (2)	0.04 - 0.10	4.0
6.5	16.06 (3)	-58.2 (5)	-	-	0.01 - 0.08	9.1
6.5	-	-	2.652(10)	-0.241 (2)	0.06 - 0.10	8.8

Tabelle 3.10: Ergebnisse der Fits der Massenabhängigkeit mit den Ansätzen (3.33) für kleine Massen und (3.17) mit $O(2)$ -Exponenten für größere Massen.

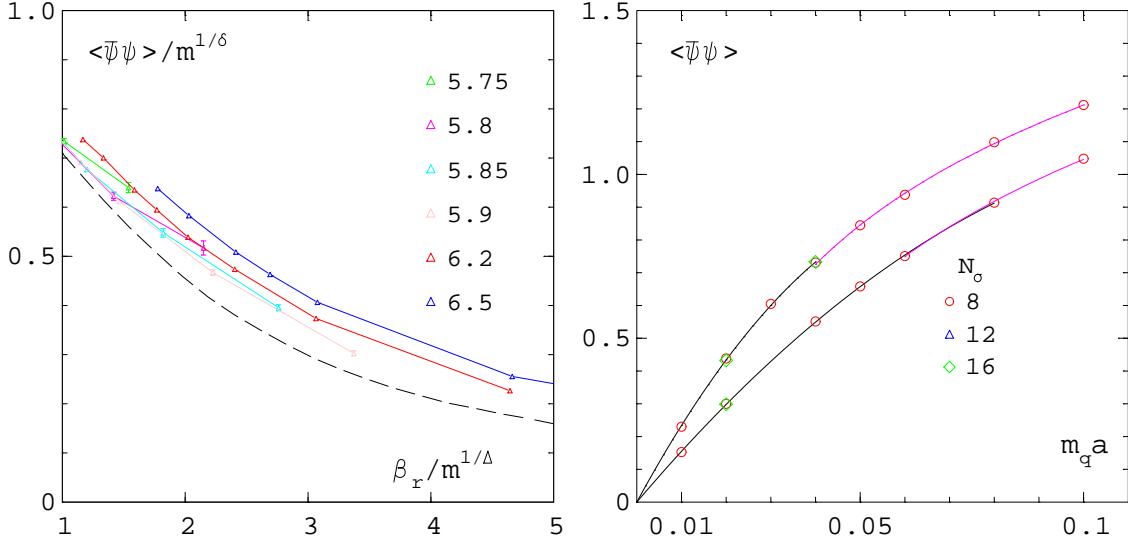


Abbildung 3.16: (a) $\langle \bar{\psi}\psi \rangle / m^{1/\delta}$ aufgetragen gegen $z = \beta_r / m^{1/\Delta}$ mit $O(2)$ -Exponenten für $z > 1$. Die gestrichelte schwarze Linie zeigt die $O(2)$ -Skalenfunktion. (b) $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ aufgetragen gegen $m_q a$ für $\beta = 6.2$ (obere Daten) und $\beta = 6.5$ (untere Daten). Die schwarzen Linien entsprechen dem Ansatz (3.33), die pinkfarbenen dem Ansatz (3.17) mit den Parametern aus Tabelle 3.10.

Daten benutzen, nur die Koeffizienten verändern sich.

Die Massenabhängigkeit bei kleinen Werten von z und konstantem β , also großen Massen, kennen wir schon. Sie wird durch Gleichung (3.17) beschrieben. Wie wir schon in Kapitel 3.3.2 gesehen haben, gilt dieser Ansatz etwas von der kritischen Kopplung entfernt nur bei mittleren Massen. Dies bestätigt sich auch hier. Tabelle 3.10 zeigt die Ergebnisse der Fits zu Gleichung (3.17) mit $O(2)$ -Exponenten. Versucht man, noch kleinere Massen als in der Tabelle angegeben mitzunehmen, steigt das $\chi^2/d.o.f$ um einen Faktor 3-4 an.

Für den Bereich $z \rightarrow \infty$, also $m_q a \rightarrow 0$ bei konstantem $\beta > \beta_c$, ist das führende asymptotische Verhalten durch

$$f_{\bar{\psi}\psi} \stackrel{z \rightarrow \infty}{\approx} C^+ d_c^{-\delta} B^{\delta-1} z^{-\gamma} = R_\chi z^{-\gamma} \quad (3.30)$$

gegeben [51]. Als asymptotische Entwicklung kann man

$$f_{\bar{\psi}\psi} = z^{-\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^{-\Delta n}, \quad (3.31)$$

mit $f_0 = R_\chi$ ansetzen[51], woraus sich für die Massenabhängigkeit des chiralen Kondensats die Formel

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}\psi \rangle(m_q a) &= m \beta_r^{-\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^{-\Delta n} \\ &= \beta_r^{-\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} f_n \beta_r^{-\Delta n} m^{n+1} \end{aligned} \quad (3.32)$$

ergibt. Für kleine Massen erhält man daraus

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle(m_q a) = e_0(\beta)(m_q a) + e_1(\beta)(m_q a)^2 + \dots \quad (3.33)$$

mit $e_0(\beta) = R_\chi \beta_r^{-\gamma} / (m_q a)_0$ und $e_1(\beta) = f_1 \beta_r^{-\gamma-\Delta} / (m_q a)_0^2$. Versucht man nun die Daten für die beiden Kopplungen mit diesem Ansatz zu fitten, zeigt sich, dass nur der erste Term alleine nicht ausreicht, dafür sind die Massen noch zu groß. Mit den ersten beiden Termen aber erhält man ein akzeptables $\chi^2/d.o.f.$. Die Ergebnisse dieser Fits mit $O(2)$ -Exponenten sind in Tabelle 3.10 aufgeführt.

Man kann nun die Fitergebnisse mit den Vorhersagen des Skalenansatzes vergleichen. Mit $R_\chi = 1.356$ [35] erhält man $e_0(6.2) = 18.21$ und $e_0(6.5) = 10.47$, die Fitergebnisse sind also zu hoch. Dies passt aber genau dazu, dass die Kurven oberhalb der Skalenfunktionen liegen.

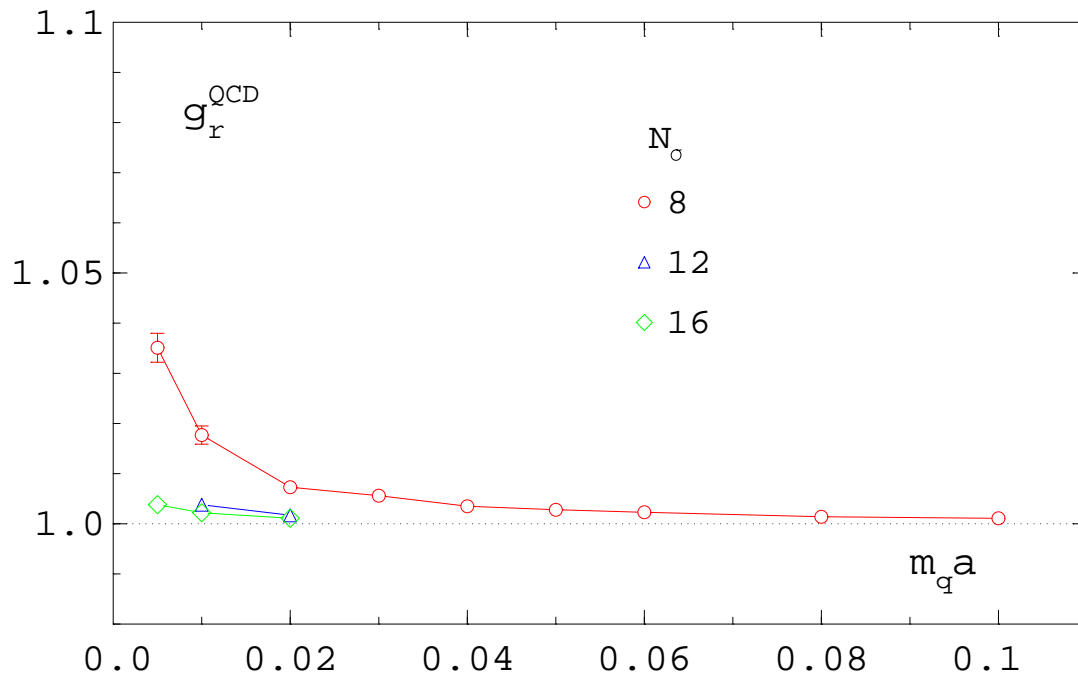
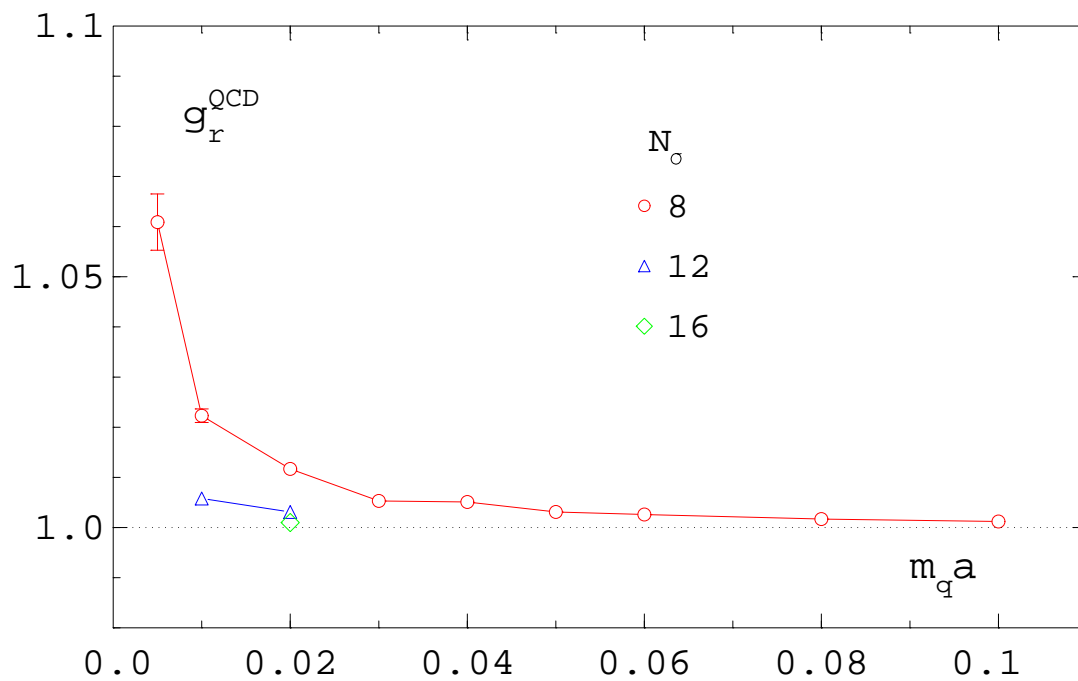
Abbildung 3.16 (b) zeigt das chirale Kondensat für die beiden Kopplungen in Abhängigkeit von der Masse zusammen mit den jeweiligen Fitkurven für das Verhalten bei kleinen und großen z . Trotz des gerade bei $\beta = 6.5$ recht großen $\chi^2/d.o.f.$ passen die Fitkurven optisch sehr gut zu den Punkten. Wahrscheinlich sind deren Fehler einfach unterschätzt.

3.8 Binderkumulante

Eine weitere Möglichkeit, die Universalitätsklasse herauszufinden, besteht darin, den Wert der Binderkumulante am kritischen Punkt zu bestimmen. Leider sind im Gegensatz zu Spinmodellen in der aQCD keine Simulationen am kritischen Punkt möglich. Aber man kann versuchen, die Binderkumulante bei der kritischen Kopplung zu verschwindender Masse zu extrapolieren.

Da bei der kritischen Kopplung keine Simulationen durchgeführt worden sind, betrachten wir die beiden nächsten β -Werte 5.6 (Abbildung 3.17) und 5.65 (Abbildung 3.18). Hier ist im Gegensatz zum chiralen Kondensat und dessen Suszeptibilität ein systematischer Finite-Size-Effekt zu sehen. Wenn man die wenigen Daten des $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitters zu höheren Massen extrapoliert, dürften sie frühestens ab $m_q a \approx 0.06$ mit den Daten des $8^3 \times 4$ übereinstimmen. Auch bei den Spinmodellen (siehe Abbildungen 2.7 und 2.8) zeigt die Binderkumulante schon bei größeren H -Werten als die anderen Observablen sichtbare Finite-Size-Effekte.

In dem untersuchten Massenbereich bleibt die Binderkumulante nahe bei dem Grenzwert $g_r^{QCD} = 1$ für $m_q a \rightarrow \infty$, erst bei den kleinsten Massen steigt sie ein wenig an. Die Werte sind aber noch weit unterhalb der universellen Werten für die $O(2)$ - oder $O(6)$ -Universalitätsklasse (1.863 beziehungsweise 2.184), so dass mit den vorliegenden Daten keinerlei Aussagen über die Universalitätsklasse getroffen werden können. Dazu bräuchte man Simulationen bei noch weitaus kleineren Massen, wobei aber $8^3 \times 4$ -Gitter für eine grobe Einordnung wahrscheinlich ausreichen würden.

Abbildung 3.17: Die Binderkumulante g_r^{QCD} bei $\beta = 5.6$.Abbildung 3.18: Die Binderkumulante g_r^{QCD} bei $\beta = 5.65$.

Kapitel 4

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die von Martin Lütgemeier und Frithjof Karsch begonnene Untersuchung der QCD mit zwei leichten Kogut-Susskind-Fermionen in der adjungierten Darstellung [1, 7] fortgeführt. Die Hauptziele bestanden dabei in der Untersuchung des Goldstone-Effekts und der Bestimmung der Universalitätsklasse des chiralen Phasenübergangs. Dazu wurden in dieser Arbeit auch die Ergebnisse unserer Untersuchungen des dreidimensionalen $O(2)$ - und $O(6)$ -symmetrischen Spinmodells zusammengefasst.

Um die Daten der vorhergehenden Untersuchung benutzen zu können, haben wir uns dazu entschlossen, keine verbesserte Wirkung zu benutzen. Außerdem reicht für die von uns betrachteten Größen die Standard-Wirkung vollkommen aus, die Nachteile der verbesserten Wirkungen (zusätzlicher Zeitaufwand, effektive Erhöhung der physikalischen Massen) überwiegen in diesem Fall deren Vorteile.

Die Abbildung 4.1 zeigt eine Übersicht unserer Ergebnisse bei kleinen Massen und insbesondere die Extrapolationen der Daten zu verschwindender Masse. Diese Ergebnisse werden im Folgenden weiter erläutert.

In der Arbeit von Martin Lütgemeier wurde aus den Extrapolationen des Goldstone-Effekts zu verschwindender Masse die chirale kritische Kopplung zu $\beta_c = 5.80(5)$ festgestellt. Allerdings liegt die pseudokritische Kopplung der kleinsten Masse unterhalb dieses Wertes, deutet also auf eine kleinere kritische Kopplung hin. Deshalb haben wir als erstes die kritischen Kopplung mit verschiedenen Methoden neu bestimmt.

Die erste Methode besteht in der Lokalisierung der pseudokritischen Kopplungen, die durch das Maximum der Suszeptibilität bei fester Masse definiert sind. Mit einem Skalenansatz, der auch die kritischen Exponenten enthält, kann man daraus die kritische Kopplung extrapolieren. Leider sind die Maxima in diesem Fall sehr breite Plateaus, so dass die pseudokritischen Kopplungen und damit auch die kritische

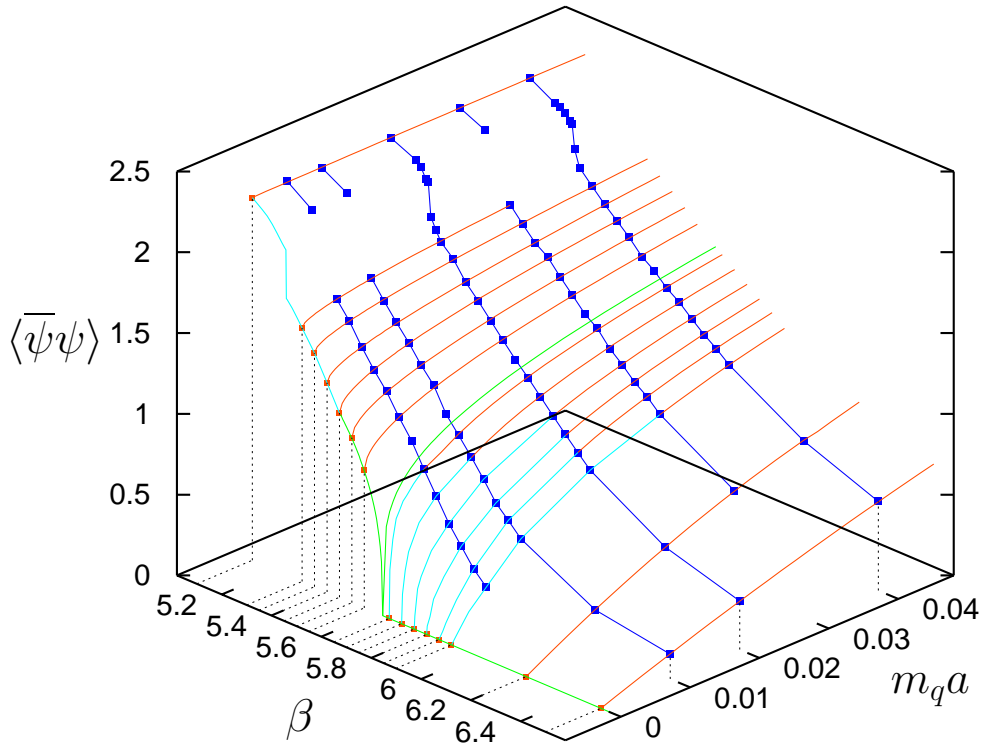


Abbildung 4.1: Dreidimensionaler Plot des chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ für alle β -Werte und $m_q a \leq 0.04$ bei $N_\sigma = 8$. Die dunkelblauen Linien verbinden gleiche Massen, die grünen Linien zeigen die Fits des kritischen Verhaltens auf der Koexistenzlinie und der kritischen Isotherme. Die roten Linien sind Fits der verschiedenen Massenabhängigkeiten, und die hellblauen Linien zeigen unsere Erwartungen für die Bereiche, in denen wir nicht genug Daten haben. Die schwarzen, gepunkteten Linien sollen die Höhe verdeutlichen und bei der Zuordnung der β -Werte helfen.

Kopplung sehr große Fehler haben. Mit $O(2)$ -Exponenten erhält man $\beta_c = 5.72(16)$, mit $O(6)$ -Exponenten $\beta_c = 5.71(19)$. Diese Methode kann also den kritischen Punkt nicht genauer bestimmen, zeigt aber, dass die kritische Kopplung wahrscheinlich kleiner als $\beta_c = 5.8$ ist.

Eine weitere Methode besteht darin zu untersuchen, bei welchem β das erwartete Skalenverhalten der kritischen Isotherme am ehesten vorliegt. Damit erhält man zwar nur eine sehr grobe Abschätzung der kritischen Kopplung, gleichzeitig aber auch einen Wert für den kritischen Exponenten δ . Es zeigt sich, dass die Daten im Bereich um $\beta = 5.65$ am besten durch das Skalenverhalten beschrieben werden. Hier erhält man auch einen Wert für den kritischen Exponenten δ , der nahe dem Wert des $O(2)$ - und $O(6)$ -Spinmodells liegt.

Für die obigen Methoden werden möglichst kleine Massen benötigt, die aber bei Simulationen mit dynamischen Fermionen viel Zeitaufwand erfordern. Führt man eine Taylorentwicklung der Skalenfunktion $f_{\bar{\psi}\psi}(z)$ durch, erhält man einen Ansatz

für die Massenabhängigkeit bei konstantem β , der bei kleinen z , also bei größerer Masse, gilt. Wiederum funktionieren die Fits mit diesem Ansatz in der Region um $\beta = 5.65$ am besten, mit der kritischen Amplitude $d_c = 2.66(1)$ für $O(2)$ -Exponenten und $d_c = 2.67(3)$ für $O(6)$ -Exponenten. Zusätzlich ist der zweite Fitparameter eine Funktion von $\beta_c - \beta$, so dass dessen Nullstelle die kritische Kopplung bestimmt. Diese ist nahezu unabhängig von den verwendeten Exponenten, nämlich $\beta_c = 5.6240(23)$ für $O(2)$ -Exponenten und $\beta_c = 5.6235(2)$ für $O(6)$ -Exponenten.

Als nächstes wurde der Goldstone-Effekt untersucht. Das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ direkt oberhalb des Deconfinement-Phasenübergangs ($\beta_d = 5.236(2)$) lässt sich bis $\beta = 5.4$ gut als lineare Funktion von $m_q a^{1/2}$ beschreiben, wie aufgrund des Goldstone-Effekts eines dreidimensionalen $O(N)$ -invarianten Spinmodells erwartet. Bei größeren β -Werten, näher am chiralen kritischen Punkt, benötigt man zusätzlich den nächsten Term der Entwicklung in $m_q a$, ähnlich wie es bei den Spinmodellen der Fall ist.

Die aQCD wirkt also in diesem Temperaturbereich wie ein effektives dreidimensionales Spinmodell.

Wendet man die Ableitung der Fits des chiralen Kondensates auf die Daten des unzusammenhängenden Anteils χ_{dis} der chiralen Suszeptibilität an, so zeigt sich für $\beta \leq 5.6$ eine gute Übereinstimmung, ab $\beta = 5.65$ aber liegen die Daten unterhalb der Fitkurven. Das bedeutet, dass hier der zusammenhängende Anteil χ_{conn} nicht mehr vernachlässigt werden darf.

Unterhalb des Deconfinement-Phasenübergangs ($\beta = 5.1$) zeigt das chirale Kondensat nur noch eine geringe Abhängigkeit von der Masse. Eine Unterscheidung zwischen dem dreidimensionalen und dem vierdimensionalen Goldstone-Effekt ist hier nicht möglich. Um herauszufinden, ob der Deconfinement-Phasenübergang die effektive Dimension der Theorie ändert, sind deshalb unterhalb von T_d weitaus genauere Simulationen bei kleinerer Masse notwendig.

Die Ableitung des chiralen Kondensats für $T < T_d$ passt nicht zu den χ_{dis} -Daten, die Daten liegen (vor allem bei den kleinen Massen) viel zu hoch. Dies wird wahrscheinlich durch die Nähe des Deconfinement-Phasenübergangs verursacht.

Mit den Schätzungen des kritischen Punktes und den Extrapolationen des Goldstone-Effekts zu verschwindender Masse haben wir das Skalenverhalten auf der Koexistenzlinie überprüft. Es zeigt sich, dass es die extrapolierten Daten nur für den Bereich $5.55 \geq \beta \geq 5.45$ ohne Skalenkorrekturen beschreibt. Die Kopplung $\beta = 5.6$ liegt wahrscheinlich schon zu nahe am kritischen Punkt, so dass hier der Goldstone-Effekt in das kritische Verhalten übergeht. Die Werte $\beta < 5.45$ befindet sich bereits außerhalb der Skalenregion, so dass man große Skalenkorrekturen benötigt, um ihr Verhalten zu beschreiben. Die kritische Amplitude ist $B = 2.10(2)$ für $O(2)$ -Exponenten und $B = 2.43(2)$ für $O(6)$ -Exponenten. Ein Fit mit freien Exponenten

ergibt $\beta_e = 0.34(3)$ und $B = 2.06(12)$, stimmt innerhalb der Fehler also mit den $O(2)$ -Werten überein.

Mit den obigen Werten für die kritische Kopplung und die kritischen Amplituden haben wir untersucht, ob die Daten auf einer Skalenfunktion $f_{\bar{\psi}\psi}(z)$ liegen und ob diese mit der Skalenfunktion f_G des entsprechenden Spinmodells übereinstimmt. Mit den $O(2)$ -Werten skalieren die Daten bei kleinen $|z|$ sehr gut und liegen dort auch auf der Skalenfunktion des Spinmodells. Bei größeren $|z|$ treten kleinere Abweichungen auf, die jedoch wahrscheinlich durch Skalenkorrekturen oder Finite-Size-Effekte erklärbar sind. Mit den $O(6)$ -Werten skalieren die Daten vor allem um $z = 0$ weniger gut, und der Verlauf der Daten passt nicht zu der Skalenfunktion des Spinmodells. Ein Vergleich der Ableitungen der Skalenfunktionen bei $z = 0$ ergibt ebenfalls für $O(2)$ innerhalb der Fehler den gleichen Wert, nicht aber bei $O(6)$.

Wir haben auch die Massenabhängigkeit des chiralen Kondensates weit in der chiral symmetrischen Phase, bei $\beta = 6.2$ und $\beta = 6.5$, untersucht. Diese Kopplungen liegen außerhalb der Skalenregion, zeigen aber ein ähnliches, nur leicht nach oben verschobenes Verhalten wie die Skalenfunktion. Es zeigt sich, dass die Daten bei großen Massen durch einen Skalenansatz für kleine z beschrieben werden können, bei kleinen Massen durch einen Ansatz für $z \rightarrow \infty$, wobei die Koeffizienten höher sind, als sie aus der Skalenfunktion erwartet würden. Je weiter man sich von der kritischen Kopplung entfernt, desto mehr verschiebt sich der Gültigkeitsbereich der beiden Ansätze zu immer größeren Massen.

Zuletzt haben wir noch versucht, den universellen Wert der Binderkumulante abzuschätzen und so einen weiteren Anhaltspunkt auf die Universalitätsklasse zu erhalten. Bei den untersuchten Massen sind die Werte jedoch noch zu klein, um zwischen dem $O(2)$ - und dem $O(6)$ -Wert zu unterscheiden.

Es gibt also einige Anhaltspunkte dafür, dass die aQCD mit Kogut-Susskind-Fermionen in der Universalitätsklasse des dreidimensionalen $O(2)$ -Spinmodells liegt. Allerdings gibt es noch ein paar Ungereimtheiten. So gibt es weder im chiralen Kondensat noch in dessen Suszeptibilität einen merklichen Finite-Size-Effekt, die Korrelationslänge ist also bei den betrachteten Massen noch klein. Auch dass die Binderkumulante nahe bei ihrem Grenzwert für unendliche Masse bleibt, deutet im Vergleich mit dem Verhalten bei den Spinmodellen drauf hin, dass die betrachteten Massen noch relativ groß sind.

Es wäre daher sinnvoll, die von uns gefundene Übereinstimmung bei kleineren Massen zu überprüfen und weitere Größen zu untersuchen, wie z.B. die Finite-Size-Skalenfunktionen auf der kritischen Isotherme und der pseudokritischen Linie.

Eine ähnliche Untersuchung wurde kürzlich in [46] für zwei leichte Fermionen in der fundamentalen Darstellung mit einer verbesserten Kogut-Susskind-Fermionwirkung

durchgeführt. Hier nimmt man an, dass im Kontinuum die Universalitätsklasse des $O(4)$ -Spinmodells und bei endlichem Gitterabstand die des $O(2)$ -Spinmodells vorliegt. Es wurde zwar ebenfalls der dreidimensionale Goldstone-Effekt beobachtet, und das Finite-Size-Skalenverhalten auf der pseudokritischen Linie ist mit dem der Spinmodelle verträglich. Die kritischen Exponenten der Spinmodelle zeigten aber bei den betrachteten Massen keinerlei Übereinstimmung mit den QCD-Daten, und in der Nähe des kritischen Punktes konnte auch kein Skalenverhalten festgestellt werden.

In einer anderen Untersuchung [52] mit der Standard-Kogut-Susskind-Fermionwirkung wurden statt dessen Anzeichen für einen Phasenübergang erster Ordnung gefunden, der aber im Widerspruch zu dem Goldstone-Effekt stehen würde. Wahrscheinlich stört der Deconfinement-Phasenübergang in der Umgebung der kritischen Kopplung die Signale des kontinuierlichen chiralen Phasenübergangs. Hier sind also die Eigenschaften des Phasenübergangs noch lange nicht geklärt.

Anhang A

Gleichverteilte N-dimensionale Einheitsvektoren

Jede Komponente n_i eines N-komponentigen Einheitsvektors \vec{n}_N muss die gleiche Wahrscheinlichkeitsdichte $f^N(x)$ mit $x \in [-1, 1]$ haben. In verallgemeinerten Polarkoordinaten kann man die Einheitsvektoren als $\vec{n}_N = (\sin \theta_{N-1} \vec{n}_{N-1}, \cos \theta_{N-1})$, das heißt

$$\begin{aligned} n_1 &= \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \sin \theta_{N-1} \\ n_2 &= \cos \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \sin \theta_{N-1} \\ n_3 &= \cos \theta_2 \sin \theta_3 \cdots \sin \theta_{N-1} \\ &\vdots \\ n_{N-1} &= \cos \theta_{N-2} \sin \theta_{N-1} \\ n_N &= \cos \theta_{N-1} \end{aligned} \tag{A.1}$$

schreiben, wobei $\theta_i \in [0, \pi]$ ($i \neq 1$) und $\theta_1 \in [0, 2\pi]$. Dann ist $f^N(x)$ auch die Dichte von $n_N = x = \cos \theta_{N-1}$. Da die Jacobi-Determinante für die obigen Koordinaten durch $J_N(\theta_1, \dots, \theta_{N-1}) = J_{N-1}(\theta_1, \dots, \theta_{N-2}) \sin^{N-2} \theta_{N-1}$ gegeben ist, ist die Verteilung von θ_{N-1} proportional zu $\sin^{N-2} \theta_{N-1}$. Daraus folgt

$$\begin{aligned} f_N(x) &= c_N \int_0^\pi d\theta_{N-1} \sin^{N-2} \theta_{N-1} \delta(x - \cos \theta_{N-1}) \\ &= c_N \int_{-1}^1 d\cos \theta_{N-1} (1 - \cos^2 \theta_{N-1})^{(N-3)/2} \theta_{N-1} \delta(x - \cos \theta_{N-1}) \\ &= c_N \int_{-1}^1 dy (1 - y^2)^{(N-3)/2} \delta(x - y). \end{aligned} \tag{A.2}$$

Aufgrund der Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte gilt

$$\begin{aligned} c_N^{-1} &= \int_0^\pi d\theta_{N-1} \sin^{N-2} \theta_{N-1} \\ &= \frac{(N-3)!!}{(N-2)!!} \begin{cases} \pi & \text{N gerade} \\ 2 & \text{N ungerade} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\Rightarrow c_N = \frac{(N-2)!!}{(N-3)!!} \begin{cases} \frac{1}{\pi} & \text{N gerade} \\ \frac{1}{2} & \text{N ungerade} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Insgesamt ergibt sich damit die Wahrscheinlichkeitsdichte zu

$$f_N(x) = \frac{(N-2)!!}{(N-3)!!} (1-x^2)^{(N-3)/2} \begin{cases} \frac{1}{\pi} & \text{N gerade} \\ \frac{1}{2} & \text{N ungerade} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Mit der Definition $(-1)!! = 0!! = 1$ gilt diese Formel für $N \geq 2$.

Anhang B

Tabellen der aQCD

In den folgenden Tabellen sind die Erwartungswerte des Polyakov Loops, des chiralen Kondensates, beider Suszeptibilitäten und der Binderkumulante zusammengefaßt. Zusätzlich ist die Zahl der Konfigurationen N_{conf} und die Autokorrelationszeit τ des chiralen Kondensates angegeben. Sowohl der Polyakov-Loop als auch das chirale Kondensat wurde bei jeder Konfiguration gemessen.

Die mit * gekennzeichneten Werte stammen von den Simulationen, die schon in [1] analysiert wurden. Hier wurde der Polyakov-Loop nach jeder Konfiguration, das chirale Kondensat nach jeder fünften ($8^3 \times 4$ -Gitter) beziehungsweise zweiten ($16^3 \times 4$ -Gitter) Konfiguration gemessen. Die Autokorrelationszeit τ des chiralen Kondensates wird zur besseren Vergleichbarkeit mit den neuen Ergebnissen auf die Gesamtzahl der Konfigurationen hochgerechnet. Kleinere Abweichungen zu den Werten in [1] kommen dadurch zustande, dass ich die Simulationsdaten selbst noch einmal ausgewertet habe. Ausserdem habe ich eine andere Normierung für die chirale Suszeptibilität benutzt.

Die Fehler wurden mit Hilfe der Jackknife-Methode berechnet, wobei jeweils 10 Blöcke benutzt wurden.

$m_q a = 0.005$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1125	2.257 (6)	12.98 (54)	1.0050 (2)	0.0158 (9)	0.031 (2)	5
5.200	925	2.144 (8)	11.81(195)	1.0049 (8)	0.0210(13)	0.050 (7)	9
5.300	1175	1.655 (7)	11.79(114)	1.0085 (9)	0.2712(43)	0.184(38)	31
5.350	900	1.556 (9)	11.93 (78)	1.0096 (6)	0.3042(48)	0.213(56)	38
5.400	1950	1.426 (9)	12.26 (82)	1.0117 (8)	0.3350(33)	0.137(22)	50
5.450	1100	1.315 (6)	12.18(115)	1.0138 (13)	0.3482(23)	0.124(22)	21
5.500	1925	1.216(10)	15.19(109)	1.0197 (14)	0.3696(30)	0.146(17)	84
5.550	1325	1.087(14)	15.70(191)	1.0255 (34)	0.3860(18)	0.112 (8)	101
5.600	1875	0.977(10)	17.50(138)	1.0351 (29)	0.3989(13)	0.100 (8)	38
5.650	1625	0.834(14)	22.11(213)	1.0609 (56)	0.4116(17)	0.103(17)	43
5.700	1825	0.700 (9)	20.34 (99)	1.0783 (50)	0.4219(16)	0.097(10)	51
5.750	2200	0.562 (9)	21.71(153)	1.1297(111)	0.4347 (9)	0.141(41)	32
5.800	1975	0.454(13)	20.77(173)	1.1950(115)	0.4391(15)	0.122(21)	45
5.850	1200	0.347 (6)	11.54(106)	1.1936(228)	0.4468(17)	0.076 (9)	12
5.900	1975	0.266 (5)	5.59 (59)	1.1663(177)	0.4534(18)	0.085 (8)	20
$N_\sigma = 12$							
5.700	400	0.705 (8)	15.94(202)	1.0185 (24)	0.4224(15)	0.097(14)	14
5.800	725	0.460 (7)	15.69(161)	1.0424 (35)	0.4408(13)	0.109(17)	42
$N_\sigma = 16$							
5.600	400	0.973 (7)	14.61(215)	1.0038 (6)	0.3983(19)	0.198(56)	47
5.800	400	0.456 (6)	16.67(433)	1.0196 (51)	0.4383(11)	0.105(26)	17

$m_q a = 0.01$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \psi \psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1475	2.2491 (27)	5.17 (26)	1.0020 (1)	0.0174 (7)	0.045 (5)	6
5.200	1000	2.1577 (32)	4.81 (22)	1.0020 (1)	0.0185 (9)	0.045 (3)	10
5.300	1500	1.6975(140)	9.94(115)	1.0067 (8)	0.2677(68)	0.393 (70)	195
5.350	2000	1.5871 (85)	7.16(100)	1.0055 (8)	0.3026(42)	0.232 (27)	157
* 5.400	1500	1.4865 (80)	9.92(115)	1.0086(10)	0.3232(22)	0.113 (16)	30
5.450	2000	1.3942 (81)	7.99 (90)	1.0080 (9)	0.3376(32)	0.205 (47)	92
* 5.500	2000	1.2875 (56)	10.36 (82)	1.0120(10)	0.3621(17)	0.096 (13)	30
5.550	1975	1.1954(103)	9.18(132)	1.0126(18)	0.3770(28)	0.135 (22)	70
5.600	2000	1.0487(103)	10.17 (97)	1.0177(18)	0.3968(22)	0.106 (11)	61
* 5.650	2500	0.9531 (44)	10.50 (56)	1.0223(14)	0.4032(12)	0.102 (10)	35
* 5.700	7600	0.8510 (79)	14.26 (73)	1.0384(19)	0.4141(15)	0.121 (8)	55
* 5.750	4500	0.7447 (59)	14.03 (61)	1.0477(23)	0.4249 (8)	0.108 (5)	65
* 5.800	3000	0.6315 (84)	11.35(120)	1.0554(56)	0.4332(14)	0.097 (16)	25
5.850	1975	0.5561 (89)	11.05(140)	1.0718(75)	0.4382(12)	0.091 (9)	54
* 5.900	2050	0.4739 (59)	9.74 (99)	1.0869(98)	0.4469(12)	0.086 (10)	30
* 6.200	2500	0.2300 (21)	1.14 (17)	1.0445(64)	0.4737 (7)	0.080 (5)	20
6.500	2250	0.1525 (6)	0.14 (1)	1.0123 (4)	0.4941(10)	0.122 (54)	16
$N_\sigma = 12$							
5.100	850	2.254 (2)	5.20 (43)	1.0006 (1)	0.0079 (7)	0.030 (4)	5
5.600	925	1.058 (7)	7.35(169)	1.0038 (9)	0.3923(26)	0.178 (71)	55
5.650	175	0.935 (7)	9.05(122)	1.0058 (8)	0.4129 (8)	0.019 (6)	14
5.700	1450	0.838 (6)	10.39(161)	1.0082(14)	0.4153(15)	0.097 (19)	60
5.750	1450	0.745 (5)	10.49(192)	1.0112(20)	0.4231(11)	0.071 (7)	61
5.800	1200	0.615 (7)	11.34(204)	1.0168(32)	0.4364(18)	0.104 (20)	61
5.850	1500	0.562 (8)	10.90(175)	1.0210(36)	0.4396(17)	0.104 (27)	59
5.900	1500	0.472 (6)	7.37(121)	1.0195(31)	0.4441(12)	0.290(228)	149
$N_\sigma = 16$							
5.600	575	1.0395 (57)	9.89(239)	1.0022 (5)	0.3971(11)	0.082 (10)	44
5.700	550	0.8391 (72)	12.57(347)	1.0043(12)	0.4128 (9)	0.056 (14)	44
5.800	1500	0.6329 (68)	16.29(328)	1.0097(20)	0.4344(15)	0.155 (39)	103

$m_q a = 0.02$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1250	2.2496 (26)	2.51 (13)	1.0010 (1)	0.0155(10)	0.036 (4)	7
* 5.200	2000	2.1793 (36)	3.81 (33)	1.0016 (1)	0.0183(15)	0.049 (9)	10
* 5.220	2000	2.1473 (75)	4.60 (46)	1.0019 (2)	0.0198(19)	0.061 (15)	160
* 5.240	4000	2.0884 (48)	4.53 (28)	1.0020 (1)	0.0227(19)	0.070 (12)	65
* 5.250	4000	2.0730 (43)	4.22 (29)	1.0019 (1)	0.0334(48)	0.199 (82)	130
* 5.260	4050	1.8666(112)	6.87(112)	1.0038 (6)	0.2051(79)	0.510(121)	460
* 5.280	5000	1.7977(109)	7.31(146)	1.0044 (9)	0.2350(76)	0.483(147)	350
* 5.300	4000	1.7377(103)	7.45 (96)	1.0048 (6)	0.2589(58)	0.397 (96)	190
* 5.350	4000	1.6641 (54)	5.78 (44)	1.0041 (3)	0.2824(31)	0.261 (33)	95
* 5.400	4200	1.5524 (44)	6.09 (40)	1.0049 (3)	0.3157(20)	0.176 (24)	95
5.450	1975	1.4717 (68)	4.70 (47)	1.0042 (4)	0.3336(24)	0.130 (20)	75
* 5.500	4600	1.3802 (66)	6.92 (43)	1.0071 (5)	0.3510(25)	0.170 (26)	145
5.550	2000	1.2909 (50)	5.33 (54)	1.0063 (6)	0.3679(13)	0.192 (47)	29
5.600	2000	1.2049 (52)	5.46 (49)	1.0073 (7)	0.3817(16)	0.117 (11)	51
5.650	1800	1.1247 (81)	7.65 (71)	1.0117(11)	0.3890(25)	0.161 (24)	54
* 5.700	5000	1.0409 (49)	7.17 (37)	1.0129 (6)	0.4020 (8)	0.132 (7)	55
* 5.750	6000	0.9566 (45)	6.99 (47)	1.0149(11)	0.4127 (9)	0.127 (7)	70
* 5.800	5600	0.8728 (48)	7.71 (40)	1.0197(10)	0.4206(14)	0.105 (9)	70
* 5.850	4000	0.7938 (43)	6.94 (34)	1.0212(12)	0.4314(12)	0.104 (7)	35
* 5.900	4050	0.7174 (53)	5.70 (40)	1.0214(17)	0.4390(13)	0.099 (8)	35
* 6.200	1000	0.4382 (32)	2.34 (23)	1.0238(23)	0.4672(16)	0.085 (9)	15
* 6.500	2000	0.2999 (7)	0.52 (3)	1.0115 (6)	0.4918 (9)	0.072 (6)	20
$N_\sigma = 12$							
5.100	1200	2.245 (1)	2.68 (17)	1.0003 (1)	0.0087 (5)	0.035 (5)	16
5.600	2650	1.207 (3)	4.34 (60)	1.0017 (2)	0.3819(14)	0.098 (17)	85
5.625	1700	1.169 (4)	7.64 (87)	1.0032 (4)	0.3836(13)	0.139 (23)	49
5.650	3250	1.109 (7)	6.58 (80)	1.0031 (4)	0.3948(27)	0.191 (44)	341
5.675	1975	1.087 (5)	6.13 (77)	1.0030 (4)	0.3965(17)	0.136 (24)	58
5.700	3200	1.037 (5)	7.27(118)	1.0039 (6)	0.4008(14)	0.128 (11)	67
5.725	2000	1.001 (3)	7.01 (68)	1.0040 (4)	0.4066 (9)	0.130 (18)	29
5.750	2050	0.944 (7)	8.04(150)	1.0052(10)	0.4138(14)	0.115 (19)	127
5.800	2100	0.871 (5)	5.96(105)	1.0046 (8)	0.4227(16)	0.122 (17)	86
5.850	2025	0.800 (6)	6.62 (98)	1.0060 (9)	0.4281(19)	0.144 (32)	155
5.900	2025	0.724 (5)	5.87 (70)	1.0064 (8)	0.4395(20)	0.124 (25)	90

$m_q a = 0.02$							
$N_\sigma = 16$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
* 5.200	1760	2.1574(13)	4.13 (14)	1.0002(1)	0.0065 (3)	0.048 (3)	34
* 5.250	2500	2.0890(65)	10.84(530)	1.0006(3)	0.0099 (9)	0.099(12)	262
* 5.400	1200	1.5661(19)	4.72 (50)	1.0005(1)	0.3119 (6)	0.111(16)	30
5.550	1700	1.3012(32)	4.59 (63)	1.0007(1)	0.3662(11)	0.117(35)	83
5.600	1725	1.2171(48)	6.98(190)	1.0011(3)	0.3760(17)	0.209(37)	125
5.625	1750	1.1681(27)	4.80 (69)	1.0009(1)	0.3850(15)	0.175(41)	81
5.650	1750	1.1181(31)	5.16 (73)	1.0010(1)	0.3903 (7)	0.070 (7)	126
5.675	1700	1.0748(22)	4.41 (75)	1.0009(2)	0.3996 (6)	0.076 (9)	47
* 5.700	1600	1.0374(34)	7.36 (97)	1.0017(2)	0.4022 (6)	0.114 (8)	44
5.750	1425	0.9647(26)	5.96(106)	1.0016(3)	0.4087(11)	0.124(27)	45
* 5.800	1800	0.8738(22)	6.80 (60)	1.0022(2)	0.4225 (6)	0.095(13)	46
* 5.900	1800	0.7277(28)	6.16 (84)	1.0028(4)	0.4350 (7)	0.092(13)	42
* 6.000	1000	0.6059(21)	5.11 (47)	1.0034(3)	0.4480 (9)	0.106(22)	30
* 6.200	800	0.4324(15)	2.03 (23)	1.0027(3)	0.4691 (9)	0.098(23)	10
* 6.500	400	0.2987 (6)	0.52 (4)	1.0014(1)	0.4914 (6)	0.067 (5)	8

$m_q a = 0.03$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1450	2.251 (3)	1.97 (13)	1.0008 (1)	0.0175 (5)	0.039 (4)	26
5.200	975	2.179 (5)	2.17 (19)	1.0009 (1)	0.0188(13)	0.047 (5)	75
5.300	1725	1.785(12)	5.83(135)	1.0036 (8)	0.2477(78)	0.449(135)	148
5.350	1975	1.698 (8)	4.67 (87)	1.0031 (6)	0.2782(40)	0.271 (28)	83
5.400	1750	1.614 (8)	3.97 (42)	1.0030 (3)	0.3084(51)	0.268 (39)	95
5.450	2000	1.561 (7)	4.30 (53)	1.0034 (4)	0.3152(39)	0.218 (34)	96
5.500	1975	1.471 (8)	4.04 (67)	1.0036 (6)	0.3355(44)	0.200 (36)	114
5.550	2000	1.390 (7)	4.14 (38)	1.0042 (4)	0.3550(21)	0.121 (16)	40
5.600	1725	1.304 (7)	4.94 (65)	1.0056 (8)	0.3710(19)	0.119 (16)	75
5.650	2000	1.248 (6)	4.27 (41)	1.0053 (5)	0.3748(31)	0.176 (34)	61
5.700	1975	1.156 (5)	5.79 (57)	1.0085 (8)	0.3948(17)	0.120 (14)	31
5.750	1950	1.090 (5)	4.38 (25)	1.0072 (4)	0.4039(16)	0.101 (11)	32
* 5.800	1000	1.012 (5)	4.94 (38)	1.0093 (7)	0.4171(20)	0.097 (9)	20
5.850	2000	0.957 (6)	5.11 (64)	1.0109(13)	0.4203(23)	0.126 (14)	43
5.900	2307	0.883 (4)	4.33 (17)	1.0108 (5)	0.4304(13)	0.100 (9)	21
* 6.200	1000	0.605 (4)	3.19 (47)	1.0171(24)	0.4635(17)	0.098 (16)	20

$m_q a = 0.04$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1250	2.257 (2)	1.37 (7)	1.0005 (1)	0.0177 (10)	0.042 (5)	14
* 5.200	2500	2.167 (5)	2.44 (28)	1.0010 (1)	0.0191 (15)	0.054 (8)	160
* 5.220	3000	2.155 (3)	2.18 (15)	1.0009 (1)	0.0198 (8)	0.049 (3)	30
* 5.240	2500	2.129 (4)	2.42 (25)	1.0010 (1)	0.0285 (25)	0.119 (17)	100
* 5.260	3000	2.094(10)	4.20 (81)	1.0019 (4)	0.0299 (42)	0.160 (47)	250
* 5.270	2200	2.082 (4)	2.41 (24)	1.0011 (1)	0.0255 (26)	0.086 (16)	105
* 5.280	7000	1.932(20)	11.36(244)	1.0060(12)	0.1571(207)	2.495(799)	1180
* 5.300	5000	1.833 (6)	3.69 (28)	1.0021 (2)	0.2256 (63)	0.520 (86)	180
* 5.350	5000	1.750 (5)	3.88 (42)	1.0025 (3)	0.2631 (40)	0.301 (45)	135
* 5.400	5000	1.670 (6)	3.54 (38)	1.0025 (3)	0.2918 (31)	0.204 (21)	180
5.450	2000	1.602 (4)	2.92 (48)	1.0022 (4)	0.3069 (26)	0.165 (21)	59
* 5.500	5000	1.531 (4)	4.10 (40)	1.0034 (3)	0.3296 (28)	0.181 (25)	70
5.550	2000	1.446 (7)	4.14 (43)	1.0039 (4)	0.3489 (32)	0.187 (36)	63
5.600	2000	1.391 (5)	3.52 (50)	1.0035 (5)	0.3610 (25)	0.151 (22)	56
5.650	2000	1.316 (7)	4.52 (45)	1.0051 (5)	0.3765 (28)	0.149 (27)	42
* 5.700	3000	1.262 (3)	3.87 (34)	1.0047 (4)	0.3841 (20)	0.124 (10)	30
* 5.750	6200	1.192 (2)	3.80 (15)	1.0052 (2)	0.3940 (12)	0.121 (9)	50
* 5.800	5000	1.127 (3)	4.05 (22)	1.0062 (4)	0.4060 (10)	0.122 (5)	65
* 5.850	5000	1.070(30)	4.14 (27)	1.0071 (4)	0.4150 (13)	0.125 (8)	25
* 5.900	4300	1.005 (4)	4.09 (25)	1.0076 (5)	0.4256 (8)	0.103 (8)	95
* 6.200	2300	0.731 (3)	2.10 (11)	1.0077 (4)	0.4591 (15)	0.091 (6)	45
* 6.500	5000	0.551 (1)	1.12 (4)	1.0072 (2)	0.4880 (8)	0.081 (5)	35
$N_\sigma = 12$							
5.100	2200	2.257 (1)	1.54 (8)	1.0002 (1)	0.0096 (7)	0.040 (4)	92
5.700	1975	1.262 (3)	3.86 (42)	1.0014 (3)	0.3848 (17)	0.151 (22)	38
5.800	2225	1.133 (2)	3.50 (32)	1.0016 (2)	0.4045 (8)	0.095 (6)	46
5.900	2200	1.020 (3)	3.80 (32)	1.0021 (3)	0.4203 (10)	0.106 (10)	56
$N_\sigma = 16$							
* 5.250	800	2.112 (2)	2.50 (27)	1.0001 (1)	0.0074 (8)	0.057 (23)	50
* 5.400	1000	1.666 (4)	4.85(114)	1.0004 (1)	0.2932 (22)	0.277 (79)	118
* 5.700	600	1.253 (2)	3.91 (77)	1.0006 (1)	0.3871 (7)	0.115 (24)	26
* 6.200	600	0.733 (3)	3.78 (60)	1.0017 (3)	0.4592 (9)	0.109 (15)	32

$m_q a = 0.05$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1450	2.258 (3)	1.23 (8)	1.0005(3)	0.0166 (9)	0.037 (6)	58
5.200	1000	2.182 (4)	1.31(10)	1.0005(1)	0.0192 (15)	0.049 (6)	79
5.300	1975	1.900(10)	3.67(71)	1.0020(4)	0.1848(118)	0.873(247)	186
* 5.330	2000	1.814 (7)	3.76(45)	1.0022(3)	0.2441 (46)	0.281 (37)	95
* 5.350	5950	1.774 (5)	3.11(23)	1.0019(2)	0.2629 (29)	0.288 (50)	110
* 5.370	5900	1.757 (5)	3.42(34)	1.0022(2)	0.2655 (37)	0.319 (72)	170
* 5.400	4000	1.707 (3)	2.91(12)	1.0019(1)	0.2861 (31)	0.203 (27)	90
* 5.500	4600	1.579 (3)	3.20(31)	1.0028(2)	0.3230 (21)	0.171 (18)	70
5.550	2000	1.518 (4)	2.51(21)	1.0021(2)	0.3371 (32)	0.171 (15)	36
5.600	2000	1.452 (6)	3.06(29)	1.0028(3)	0.3542 (31)	0.164 (20)	54
5.650	2000	1.390 (6)	3.05(29)	1.0031(3)	0.3652 (24)	0.205 (38)	56
5.700	5065	1.332 (3)	3.13(21)	1.0034(2)	0.3779 (8)	0.132 (11)	63
5.750	1975	1.269 (4)	2.54(29)	1.0031(3)	0.3881 (25)	0.132 (24)	30
* 5.800	3000	1.217 (4)	3.39(19)	1.0045(3)	0.3974 (26)	0.154 (20)	35
5.850	1950	1.171 (4)	3.25(27)	1.0046(4)	0.4049 (21)	0.135 (16)	38
5.900	1975	1.102 (4)	2.74(23)	1.0044(4)	0.4178 (12)	0.090 (8)	34
* 6.200	2000	0.845 (3)	2.25(23)	1.0062(6)	0.4571 (11)	0.087 (5)	15
* 6.500	2000	0.658 (2)	1.08 (8)	1.0049(3)	0.4847 (12)	0.098 (12)	20

$m_q a = 0.06$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1250	2.261(2)	0.87 (4)	1.0003(1)	0.0144 (8)	0.027 (4)	21
5.200	975	2.188(2)	0.92 (6)	1.0004(1)	0.0183(15)	0.050(13)	26
5.300	1500	1.933(9)	3.00(69)	1.0016(4)	0.1856(71)	0.392(89)	145
5.400	1975	1.734(5)	2.03(17)	1.0013(1)	0.2824(43)	0.225(38)	63
5.450	1950	1.668(5)	2.49(18)	1.0017(1)	0.3042(42)	0.238(43)	93
5.500	1975	1.623(4)	2.04(21)	1.0015(2)	0.3149(44)	0.215(51)	37
5.550	1950	1.556(5)	2.33(38)	1.0019(3)	0.3371(31)	0.166(13)	148
5.600	2225	1.510(5)	2.68(32)	1.0023(3)	0.3437(24)	0.192(25)	85
5.650	1950	1.452(4)	2.82(28)	1.0026(3)	0.3620(21)	0.168(22)	42
5.700	5126	1.391(3)	2.57(13)	1.0026(1)	0.3727(12)	0.133 (9)	51
5.750	1975	1.338(4)	2.32(22)	1.0025(2)	0.3815(23)	0.143(12)	36
5.800	4580	1.291(4)	2.70(26)	1.0032(3)	0.3909(15)	0.134 (9)	149
5.850	2225	1.245(3)	2.68(19)	1.0034(2)	0.4012(11)	0.109(12)	27
5.900	4492	1.193(2)	2.60(19)	1.0036(3)	0.4093(12)	0.134(16)	39
6.200	4200	0.938(2)	2.07 (5)	1.0046(1)	0.4505(10)	0.106 (5)	24
6.500	2000	0.751(1)	1.15 (9)	1.0040(3)	0.4805 (7)	0.077 (8)	27
$N_\sigma = 12$							
5.700	2175	1.399(3)	2.63(36)	1.0008(1)	0.3665(17)	0.155(20)	80
5.800	2175	1.295(1)	2.48(17)	1.0009(1)	0.3901 (7)	0.100 (9)	32
5.900	2225	1.193(2)	2.38(15)	1.0010(1)	0.4100(12)	0.133(20)	30

$m_{\mathbf{q}\mathbf{a}} = 0.08$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1425	2.258 (1)	0.73 (5)	1.0003(1)	0.0161 (10)	0.044 (4)	28
* 5.200	1000	2.204 (4)	1.43 (17)	1.0006(1)	0.0168 (9)	0.038 (4)	35
* 5.260	3000	2.137 (3)	1.33 (18)	1.0006(1)	0.0226 (13)	0.080 (15)	135
* 5.280	3300	2.095 (5)	1.57 (14)	1.0007(1)	0.0316 (26)	0.133 (15)	205
* 5.300	7000	2.050(15)	6.05(173)	1.0027(8)	0.0629(171)	1.760(631)	1065
* 5.320	5000	1.940 (8)	2.94 (37)	1.0015(2)	0.1816 (83)	0.695(113)	460
* 5.350	3000	1.873 (6)	2.31 (26)	1.0013(2)	0.2304 (56)	0.381 (87)	210
* 5.400	3000	1.812 (5)	2.10 (28)	1.0013(2)	0.2530 (46)	0.294 (49)	190
5.450	2000	1.748 (3)	1.76 (18)	1.0011(1)	0.2873 (31)	0.174 (15)	42
* 5.500	3000	1.690 (5)	2.08 (19)	1.0014(1)	0.3029 (42)	0.232 (31)	65
5.550	2000	1.644 (3)	1.89 (20)	1.0014(1)	0.3184 (30)	0.223 (53)	42
5.600	1950	1.595 (3)	1.86 (13)	1.0014(1)	0.3328 (17)	0.137 (15)	48
5.650	2000	1.541 (5)	2.07 (20)	1.0017(2)	0.3486 (27)	0.176 (15)	131
5.700	2250	1.495 (2)	1.73 (11)	1.0015(1)	0.3593 (12)	0.137 (22)	19
5.750	2250	1.454 (3)	1.97 (15)	1.0018(1)	0.3677 (16)	0.128 (11)	44
* 5.800	3000	1.403 (3)	2.18 (23)	1.0022(2)	0.3800 (15)	0.126 (11)	35
* 5.850	3000	1.357 (4)	2.09 (21)	1.0022(2)	0.3922 (23)	0.137 (9)	60
* 5.900	3000	1.315 (3)	2.19 (20)	1.0025(2)	0.4018 (15)	0.117 (10)	40
* 5.950	3000	1.281 (3)	2.20 (17)	1.0026(2)	0.4037 (23)	0.145 (15)	50
* 6.000	3000	1.238 (2)	2.07 (9)	1.0026(1)	0.4136 (14)	0.133 (13)	30
* 6.200	3000	1.098 (2)	1.54 (6)	1.0025(1)	0.4392 (20)	0.125 (15)	20
* 6.500	3000	0.914 (2)	1.15 (5)	1.0027(1)	0.4763 (11)	0.092 (6)	25
$N_\sigma = 12$							
5.700	2475	1.494 (2)	1.84 (20)	1.0005(1)	0.3588 (13)	0.130 (14)	73
5.800	2425	1.407 (2)	1.90 (16)	1.0006(1)	0.3790 (15)	0.153 (27)	73
5.900	2475	1.322 (2)	2.04 (22)	1.0007(1)	0.3964 (12)	0.131 (17)	48

$m_q a = 0.1$							
$N_\sigma = 8$							
β	N_{conf}	$\langle \bar{\psi}\psi \rangle$	χ_{dis}	g_r^{QCD}	L_3	χ_L	τ
5.100	1725	2.262 (2)	0.67 (4)	1.0003(1)	0.0156 (7)	0.035 (3)	81
5.200	1500	2.202 (2)	0.72 (5)	1.0003(1)	0.0181 (10)	0.050 (7)	92
5.300	975	2.093 (6)	1.53(33)	1.0007(2)	0.0294 (28)	0.106 (22)	94
* 5.330	11000	2.020(12)	4.73(95)	1.0022(5)	0.0848(176)	2.013(547)	1510
* 5.350	4200	1.937 (5)	2.12(26)	1.0011(1)	0.1880 (93)	0.634(162)	185
* 5.360	10000	1.905 (5)	1.95(23)	1.0010(1)	0.2180 (49)	0.385 (55)	395
* 5.370	6950	1.886 (3)	1.66(14)	1.0009(1)	0.2305 (21)	0.292 (22)	140
* 5.385	15000	1.871 (2)	1.71(11)	1.0010(1)	0.2393 (16)	0.283 (21)	170
* 5.400	13200	1.850 (2)	1.68(11)	1.0010(1)	0.2490 (14)	0.276 (24)	200
* 5.425	12000	1.821 (3)	1.75 (9)	1.0010(1)	0.2610 (18)	0.272 (25)	140
* 5.450	6950	1.802 (2)	1.54(10)	1.0009(1)	0.2651 (24)	0.237 (15)	145
* 5.500	6000	1.750 (3)	1.72(10)	1.0011(1)	0.2888 (30)	0.239 (33)	60
* 5.550	6000	1.704 (1)	1.57 (6)	1.0011(1)	0.3086 (11)	0.180 (10)	35
* 5.600	5600	1.659 (2)	1.55(10)	1.0011(1)	0.3219 (16)	0.164 (7)	50
* 5.650	6000	1.617 (2)	1.62 (9)	1.0012(1)	0.3347 (13)	0.184 (12)	30
* 5.700	5600	1.574 (2)	1.59 (7)	1.0012(1)	0.3497 (15)	0.158 (10)	80
* 5.750	6000	1.535 (1)	1.64 (9)	1.0014(1)	0.3576 (11)	0.166 (10)	40
* 5.800	5600	1.497 (1)	1.61 (7)	1.0014(1)	0.3677 (11)	0.147 (6)	50
5.850	2250	1.457 (3)	1.37 (8)	1.0013(1)	0.3808 (19)	0.146 (10)	35
* 5.900	4400	1.420 (2)	1.64 (8)	1.0016(1)	0.3854 (12)	0.156 (11)	40
* 6.200	4000	1.212 (1)	1.33 (8)	1.0018(1)	0.4335 (10)	0.114 (4)	15
* 6.500	4000	1.048 (1)	1.20 (5)	1.0021(1)	0.4667 (9)	0.107 (8)	20
$N_\sigma = 12$							
5.700	2075	1.577 (2)	1.19 (7)	1.0003(1)	0.3432 (15)	0.135 (15)	35
5.800	1975	1.497 (1)	1.55(20)	1.0004(1)	0.3663 (10)	0.124 (18)	39
5.900	2125	1.420 (1)	1.36(11)	1.0004(1)	0.3862 (8)	0.115 (9)	56

Literaturverzeichnis

- [1] M. Lütgemeier, *Phasenübergänge in der QCD mit fundamentalen und adjungierten Quarks*, Doktorarbeit, Bielefeld (1998)
- [2] H. Rothe, *Lattice Gauge Theories* (World Scientific, Singapore), 1992.
- [3] I. Montvay and G. Münster, *Quantum Fields on the Lattice* (Cambridge University Press, Cambridge), 1994.
- [4] R. Gupta, *Introduction to lattice QCD*, Les Houches 1997, Probing the standard model of particle interactions, Pt. 2 (1997) 83
- [5] J. B. Kogut, J. Polonyi, H. W. Wyld and D. K. Sinclair, *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 1980.
- [6] J. B. Kogut, *Phys. Lett. B* **187** (1987) 347.
- [7] F. Karsch and M. Lütgemeier, *Nucl. Phys. B* **550** (1999) 449
- [8] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction To Quantum Field Theory*, (Addison-Wesley, Reading), 1995.
- [9] S. L. Adler, *Phys. Rev.* **177**, 2426 (1969).
- [10] J. S. Bell and R. Jackiw, *Nuovo Cim. A* **60**, 47 (1969).
- [11] J. Goldstone, *Nuovo Cim.* **19** (1961) 154.
- [12] J. Goldstone, A. Salam and S. Weinberg, *Phys. Rev.* **127** (1962) 965.
- [13] R. D. Pisarski and F. Wilczek, *Phys. Rev. D* **29** (1984) 338.
- [14] K. Rajagopal, *The Chiral Phase Transition in QCD: Critical Phenomena and Long Wavelength Pion Oscillations*, Quark Gluon Plasma 2, Editor R. Hwa, World Scientific, (1995) 484.
- [15] M. E. Peskin, *Nucl. Phys. B* **175** (1980) 197.

- [16] H. Leutwyler and A. Smilga, Phys. Rev. D **46** (1992) 5607.
- [17] A. Smilga and J. J. M. Verbaarschot, Phys. Rev. D **51** (1995) 829.
- [18] C. A. Linhares and J. A. Mignaco, CBPF-NF-035-91
- [19] K. G. Wilson, Phys. Rev. D **10** (1974) 2445.
- [20] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, Phys. Lett. B **105** (1981) 219.
- [21] D. B. Kaplan, Phys. Lett. B **288** (1992) 342.
- [22] P. Hasenfratz, V. Laliena and F. Niedermayer, Phys. Lett. B **427** (1998) 125.
- [23] J. B. Kogut and L. Susskind, Phys. Rev. D **11** (1975) 395.
- [24] A. Carroll, J. B. Kogut, D. K. Sinclair and L. Susskind, Phys. Rev. D **13** (1976) 2270 [Erratum-ibid. D **14** (1976) 1729].
- [25] L. Susskind, Phys. Rev. D **16** (1977) 3031.
- [26] H. Kluberg-Stern, A. Morel, O. Napoly and B. Petersson, Nucl. Phys. B **220** (1983) 447.
- [27] S. A. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R. L. Renken and R. L. Sugar, Phys. Rev. D **35** (1987) 2531.
- [28] A. L. Talapov and H. W. J. Blöte, J. Phys. A **29** (1996) 5727
- [29] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1996
- [30] D. J. Wallace and R. K. P. Zia, Phys. Rev. B **12** (1975) 5340
- [31] R. Anishetty, R. Basu, N. D. Hari Dass and H. S. Sharatchandra, Int. J. Mod. Phys. A **14** (1999) 3467 [arXiv:hep-th/9502003].
- [32] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics **5** (1996).
- [33] R.B.Griffiths, Phys. Rev. **158** (1967) 176.
- [34] E. Brézin, D. J. Wallace and K. G. Wilson, Phys. Rev. B **7** (1973) 232.
- [35] J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes and T. Schulze, Phys. Lett. B **492** (2000) 219
- [36] J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes and T. Schulze, Phys. Lett. B **514** (2001) 299 [arXiv:hep-lat/0105028].

-
- [37] J. Engels and T. Mendes, Nucl. Phys. B **572** (2000) 289
- [38] S. Holtmann and T. Schulze, Phys. Rev. E **68** (2003) 036111
- [39] F. Karsch, E. Laermann and C. Schmidt, Phys. Lett. B **520** (2001) 41
- [40] H. W. J. Blöte, J. R. Heringa and M. M. Tsypin, Phys. Rev. E **62** (2000) 77.
- [41] A. Cucchieri, J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes and T. Schulze, J. Phys. A **35** (2002) 6517.
- [42] K. Kanaya and S. Kaya, Phys. Rev. D **51** (1995) 2404.
- [43] P. Becher, M. Böhm and H. Joos, *Eichtheorien der starken und elektroschwachen Wechselwirkung*, (Teubner, Stuttgart) 1981
- [44] W. E. Caswell, Phys. Rev. Lett. **33** (1974) 244.
- [45] E. Laermann, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **60A** (1998) 180.
- [46] S. Holtmann, *Goldstone-mode effects and critical behaviour of QCD with 2 light quark flavours*, Doktorarbeit, Bielefeld (2004).
- [47] F. Karsch and E. Laermann, Phys. Rev. D **50**, 6954 (1994)
- [48] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635.
- [49] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1195.
- [50] J. Engels, S. Mashkevich, T. Scheideler and G. Zinovjev, Phys. Lett. B **365** (1996) 219
- [51] J. Engels, L. Fromme and M. Seniuch, Nucl. Phys. B **675** (2003) 533
- [52] M. D'Elia, A. Di Giacomo and C. Pica, arXiv:hep-lat/0408011.

Danksagung

Ich möchte mich bei all denen bedanken, die mich bei der Anfertigung dieser Doktorarbeit tatkräftig unterstützt haben. Besonders zu nennen ist dabei mein Doktorvater Herr Prof. Dr. Jürgen Engels, der mich hervorragend betreut und immer geduldig alle Fragen beantwortet hat. Des weiteren danke ich Herrn Prof. Dr. Edwin Laermann dafür, dass er immer für Fragen und Diskussionen offen war und die Bürde des Gutachters auf seine Schultern genommen hat. Auch Prof. Dr. Frithjof Karsch möchte ich für viele hilfreiche Anregungen danken.

Außerdem gilt mein Dank den Mitgliedern der Arbeitsgruppe, die ich hier nicht alle namentlich aufführen kann, und natürlich auch den Sekretärinnen Gudrun und Susi, für die schöne Zeit, die ich mit ihnen zusammen verbringen konnte.

Last but not least geht ein herzlicher Dank an meinen Freund und Kommilitonen Sven Holtmann, mit dem ich fast mein ganzes Studium zusammenarbeiten durfte.

Hiermit erkläre ich, daß ich außer den im Literaturverzeichnis angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel zur Anfertigung meiner Arbeit verwendet habe.