

Diplomarbeit

Das
Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio-Modell
mit zwei und drei Flavours bei
imaginärem chemischen Potential

vorgelegt von
Christopher Pinke

Münster, 6. März 2010

Betreuer: Prof. Dr. Owe Philipsen

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Einleitung | 5 |
| 2 | Quantenchromodynamik (QCD) | 9 |
| 2.1 | Elemente aus Feldtheorie und Statistik | 9 |
| 2.2 | SU(N)-Yang-Mills-Theorie: Der Polyakovloop | 14 |
| 2.3 | Quantenchromodynamik | 16 |
| 3 | Effektive Theorien für QCD | 19 |
| 3.1 | Nambu-Jona-Lasinio-Modell (NJL-Modell) | 19 |
| 3.2 | Mean-Field-Approximation | 22 |
| 3.3 | Parameterbestimmung | 23 |
| 3.4 | Effektive Theorie für den Polyakovloop | 26 |
| 4 | Das Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio-Modell | 29 |
| 4.1 | Berechnung des thermodynamischen Potentials | 29 |
| 4.2 | Auswertung des Quarkpropagators | 30 |
| 4.3 | Eigenschaften des thermodynamischen Potentials | 34 |
| 5 | Numerische Methoden | 37 |
| 5.1 | Lösen von nichtlinearen Gleichungssystemen | 37 |
| 5.2 | Numerische Integration | 38 |
| 5.3 | Setup der Simulationen | 39 |
| 6 | Ergebnisse im Zweiflavourfall | 43 |
| 6.1 | NJL-Modell | 43 |
| 6.2 | Reine Eichtheorie | 46 |
| 6.3 | Verschwindendes chemisches Potential | 47 |
| 6.4 | Roberge-Weiss-Periodizität | 49 |
| 6.5 | Variation der Masse | 52 |
| 6.6 | Einfluss des Polyakovlooppotentials \mathcal{U}_3 | 54 |
| 7 | Ergebnisse im Dreiflavourfall | 55 |
| 7.1 | NJL-Modell | 55 |
| 7.2 | Verschwindendes chemisches Potential | 56 |
| 7.3 | Imaginäres chemisches Potential | 57 |
| 7.4 | Drei masseentartete Quarks: Roberge-Weiss-Symmetrie | 57 |
| 7.5 | Drei masseentartete Quarks: Variation der Masse | 59 |
| 7.6 | Einfluss des Polyakovlooppotentials \mathcal{U}_3 | 60 |
| 8 | Zusammenfassung und Ausblick | 61 |

| | |
|--|-----------|
| A Anhang | 63 |
| A.1 Notation | 63 |
| A.2 Benötigte Formeln | 64 |
| A.3 Integrale | 64 |
| A.4 Konvergenz der Integrale | 65 |
| A.5 Chirale Kondensate bei $T = 0$ | 65 |
| Literaturverzeichnis | 69 |

1 Einleitung

Das *Standardmodell der Elementarteilchenphysik* (SM) hat sich zur Beschreibung elementarer Prozesse etabliert. In ihm werden alle bekannten Elementarteilchen und ihre Wechselwirkungen untereinander beschrieben. Die zugehörige Lagrangedichte lautet

$$\mathcal{L}_{\text{SM}} = \mathcal{L}_{\text{QCD}} + \mathcal{L}_{\text{EW}} + \mathcal{L}_{\text{Higgs}} . \quad (1.1)$$

Hierbei ist \mathcal{L}_{EW} der elektroschwache Sektor, welcher die schwach- und elektromagnetisch wechselwirkenden *Leptonen* enthält. Nach A. Salam, S. Glashow und S. Weinberg läßt sich eine Theorie aufstellen, welche diese beiden phänomenologisch stark unterschiedlichen Gebiete vereint. \mathcal{L}_{QCD} beschreibt starkkoppelnde Teilchen, die *Quantenchromodynamik* (QCD, vom griechischen Wort für Farbe, „ $\chi\rho\omega\mu\alpha$ “). $\mathcal{L}_{\text{Higgs}}$ ist der Higgs-Sektor, welcher eine theoretische Notwendigkeit ist, um den Teilchen eine Masse zuzuweisen. Ansonsten weist das SM grundsätzlich zu fordernde Eigenschaften nicht auf. Das so postulierte „Higgs-Teilchen“ ist dementsprechend wichtig und sein Nachweis Gegenstand aktueller Experimente, beispielsweise am „Large Hadron Collider“ (lhc.web.cern.ch).

Die der starken Wechselwirkung unterliegenden Quarks bilden die *Hadronen*, die Hauptbestandteile der uns umgebenden Materie. Quarks tragen Farbladung und treten in sechs verschiedene Arten („Flavours“) auf, welche typischerweise in „Isospindupletts“

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} , \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix} , \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}$$

zusammengefasst werden. Sie unterscheiden sich in Masse und Quantenzahlen.

Ein Phänomen ist charakteristisch für QCD: das *Confinement*. Es gibt drei verschiedene Farbladungen, welche man als grün, rot und blau bezeichnen könnte. Kombiniert man diese drei, erhält man ein nach außen hin weißes (farbneutrales) Objekt. Den Zwang, dass nur solche „weißen“ Objekte in der Natur vorkommen, bezeichnet man als Confinement. Bei extremen Bedingungen, beispielsweise bei Beschleunigerexperimenten, kann dieser Zwang aufgebrochen werden (*Deconfinement*) und Objekte mit Nettofarbladung werden möglich. Ein aktuelles Forschungsbeispiel ist das Quark-Gluon-Plasma, ein Zustand freier Quarks und Gluonen, den Übermittlern der starken Kraft. Confinement entsteht dadurch, dass die Stärke der Wechselwirkung vom Abstand der Teilchen abhängt, was man als „laufende Kopplung“ bezeichnet. Bei großen Abständen ziehen sich die Teilchen stark, bei kleinen schwach an. Man bezeichnet sie als *asymptotisch frei*. Diesem Umstand ist es unter anderem geschuldet, dass die Theorie der QCD zwar bekannt, jedoch heutzutage nicht geschlossen lösbar ist. So versagt Störungstheorie in der Kopplung bei niedrigen Energien und ein solcher Zugang ist nicht möglich.

Gittersimulationen ermöglichen das Lösen der QCD auf numerischem Weg auch im nichtperturbativem Bereich. Auf diese Weise wird das QCD-Phasendiagramm aktuell sowohl bei endlichen Temperaturen als auch bei endlichem chemischen (Baryon-)Potential μ untersucht (für eine Übersicht siehe [1–3]). Von der asymptotischen Freiheit

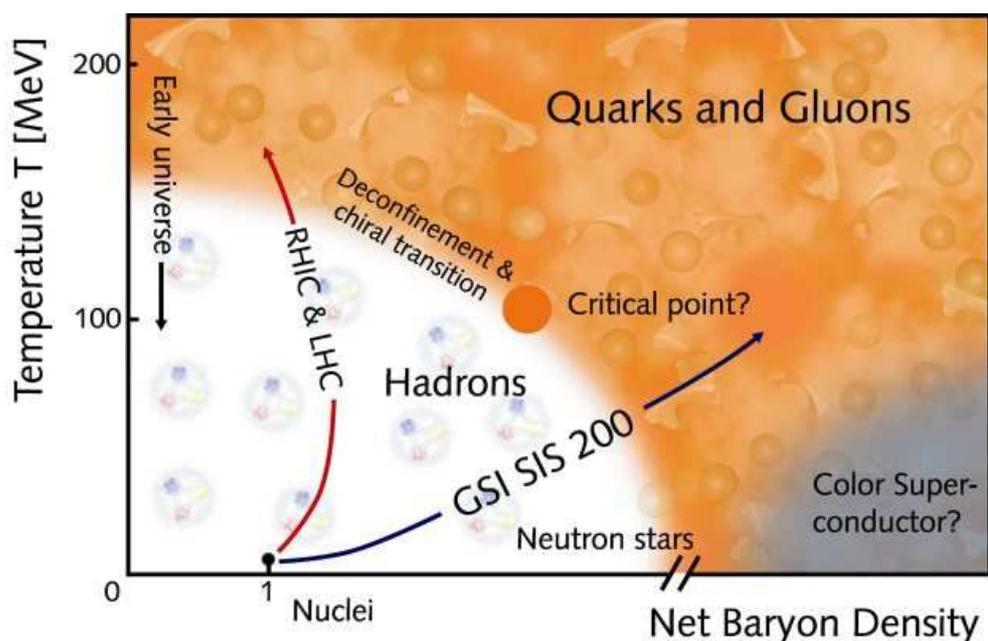


Abbildung 1.1: Das Phasendiagramm der QCD

[<http://solid13.tphys.physik.uni-tuebingen.de/faessler/Fuchs/VI/hadro.html>].

kann man auf mindestens drei Phasenbereiche schließen: eine hadronische Phase (kleine T und μ), Quark Gluon Plasma (hohe T) sowie eine farbsupraleitende Phase (hohe T , kleine μ). Bei endlichem μ und $T = 0$ existiert ein Übergang erster Ordnung zu einer supraleitenden Phase. Es stellt sich die Frage, was nun zwischen diesem und dem Deconfinementübergang bei $\mu = 0$ passiert. Es besteht die Möglichkeit eines Bereiches von Übergängen erster Ordnung, die in einem kritischen Punkt enden. Die Existenz dieses Punktes ist jedoch umstritten. Abbildung 1.1 fasst diese Erkenntnisse zusammen.

Gittersimulationen werden bei endlichem chemischen Potential durch das „Sign-Problem“ erschwert [4]. Es existieren verschiedene Möglichkeiten zur Umgehung dieses Problems, welche den kritischen Punkt betreffend aber nicht eindeutige Resultate liefern. Eine dieser Möglichkeiten ist bei rein imaginärem μ zu simulieren, um anschließend mittels analytischer Fortsetzung auf reelles μ rückschließen zu können. In diesem Bereich besitzt QCD eine Periodizität bezüglich μ , die Roberge-Weiss-Symmetrie [5].

Um einen weniger problembehafteten Zugang zu finden, lassen sich „effektive Theorien“ für die QCD formulieren. Diese sind auf einen bestimmten Aspekt ausgerichtet und erlauben durch ihre Untersuchung Rückschlüsse auf die volle Theorie. Das sogenannte „Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio-Modell“ (PNJL-Modell) stellt ein relativ junges effektives Modell der QCD dar. Es ist so konstruiert, dass es bei masselosen und leichten Quarks den chiralen Übergang der QCD zeigt und sich bei unendlich schweren Quarks wie die reine Eichtheorie verhält. Bei Variation der Masse kann es somit als Indikator für das Verhalten der QCD bezüglich Phasenübergängen dienen. Es wurde ursprünglich für $N_f = 2$ formuliert und stellt eine Theorie auf Mean-Field-Level dar [6].

Das Modell wird derzeit von verschiedenen Arbeitsgruppen untersucht. Bei zwei Flavours geben die Veröffentlichungen von Weise et al. einen guten Überblick über den aktuellen Stand bei reellem μ [8–15], wohingegen Kashiwa et al. das Modell bei ima-

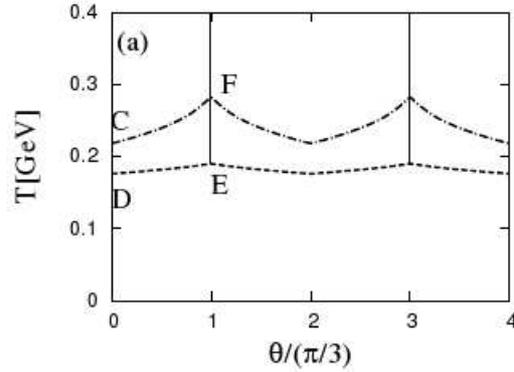


Abbildung 1.2: Das Phasendiagramm des PNJL-Modells für $N_f = 2$ bei imaginärem chemischen Potential aus [7] für eine Quarkmasse von 5.5 MeV. Die Punkte D und E verbindet eine Linie von Deconfinementübergängen, die Punkte C und F eine von chiralen Übergängen. Es handelt sich jeweils um Crossoverübergänge. Die von E ausgehende Halbgerade ist die Roberge-Weiss-Übergangslinie.

ginärem μ untersuchen [7, 16–24]. Das dort erstellte Phasendiagramm für zwei 5.5 MeV schwere Quarks ist in Abbildung 1.2 gezeigt. Eine Erweiterung auf drei Flavours gibt es ebenfalls, siehe hierzu [25], [26] und [27, 28]. In diesen wird jeweils der Fall von zwei masseentarteten leichten und einem schweren Quark bei reellem μ betrachtet. Das ursprüngliche Modell wird auch erweitert, beispielsweise wird die Mean-Field-Näherung verlassen [13] oder ein zusätzliches chemisches Isospinpotential betrachtet [24].

In dieser Arbeit wird das PNJL-Modell bei imaginärem chemischen Potential μ untersucht. Hierzu werden die Phasenübergänge des Modells in verschiedenen Parameterbereichen bestimmt. Es werden die Fälle von zwei und drei verschiedenen Quarkflavour betrachtet. In Letzterem wird das Augenmerk auf drei masseentartete Quarks gelegt.

In Kapitel 2 werden die mathematischen und phänomenologischen Grundlagen dargestellt. Es wird die zur Beschreibung des Confinement wichtige Größe des Polyakovloops eingeführt und die QCD als Feldtheorie formuliert sowie ein Überblick über deren Eigenschaften und Symmetrien gegeben. Diese werden im dritten Kapitel dazu benutzt effektive Theorien für die QCD einzuführen. Für den leichten Massenbereich ist dies das Nambu-Jona-Lasinio-Modell [29], für den Fall unendlich schwerer, statischer Quarks wird ebenfalls ein effektives Modell formuliert. In Letzterem wird hier neben zwei in der Literatur etablierten Ansätzen ein weiterer vorgeschlagen. Im vierten Abschnitt werden diese dann zum bereits erwähnten PNJL-Modell zusammengeführt. Das thermodynamische Potential Ω wird für dieses Modell berechnet und dessen wesentlichen Eigenschaften werden diskutiert. Im fünften Kapitel wird dann kurz in die zum Lösen eines zur Auswertung von Ω aufgestellten Gleichungssystems verwendeten numerischen Methoden eingeführt sowie das beim numerischen Lösen verwendete Setup erläutert. Die darauffolgenden Kapitel beinhalten die Resultate der Simulationen, in denen auf die verschiedenen Ansätze für den Polyakovloop eingegangen wird und Ω für verschiedene Massen ausgewertet wird. Abschließend werden die Ergebnisse in Kapitel Acht zusammenfassend diskutiert und ein kurzer Ausblick auf mögliche weitergehende Studien gegeben. Im folgenden Anhang sind verwendete Konventionen gegeben und Details der Simulationen aufgeführt.

2 Quantenchromodynamik (QCD)

Zur mathematischen Beschreibung der Quantenchromodynamik (QCD) werden Aspekte der thermischen Quantenfeldtheorie sowie der statistischen Physik benötigt. In diese wird im Folgenden auf Grundlage von [30] und [31] eingeführt. Danach wird kurz auf reine Eichtheorien eingegangen und die später wichtige Größe des Polyakovloops eingeführt. Abschließend wird die QCD formuliert und wesentliche Eigenschaften angegeben.

2.1 Elemente aus Feldtheorie und Statistik

Mithilfe der *statistischen Physik* werden makroskopische Gleichgewichtssysteme bei endlichen Temperaturen beschrieben. Man ist hierbei nicht am Verhalten der Einzelteile, sondern nur an den globalen Eigenschaften des Systems interessiert. Dieses hängt von äußeren Parametern wie der Temperatur oder einem chemischen Potential ab. Prominente Beispiele sind thermodynamische Systeme wie z.B. Wasser. Es interessiert hier nicht, wie sich jedes Molekül im Einzelnen bewegt, sehr wohl aber in welchem Aggregatzustand sich das Wasser bei einer gewissen Temperatur befindet.

Zentrale Größe bei der Beschreibung ist die Zustandssumme Z . Aus ihr können alle relevanten Größen des Systems wie Druck, Entropie oder Energie berechnet werden, das System ist vollständig bestimmt. Beispielsweise ist das thermodynamische Potential Ω pro Volumen definiert als $-T/V \ln Z$. Die Zustandssumme ergibt sich zu

$$Z(\beta) = \text{Tr} \left(e^{-\beta(H - \mu_i N_i)} \right) = \langle \phi_a | e^{-\beta(H - \mu_i N_i)} | \phi_a \rangle, \quad (2.1)$$

wobei H der Hamiltonoperator des Systems ist und μ_i das zu einer erhaltenen Teilchenzahl bzw. Ladung N_i gehörige chemische Potential. Die Temperatur T geht über $\beta = 1/T$ ein. In dieser und allen folgenden Formeln wird stets die Einstein'sche Summenkonvention verwendet.

Der Ausdruck $\phi_a = \phi_a(\mathbf{x}, t)$ ist ein an jedem Raumzeitpunkt definiertes Feld. Für Felder kann als Verallgemeinerung klassischer Mechanik eine *Feldtheorie* (FT) formuliert werden. Zentraler Bestandteil der FT sind die Lagrangedichte $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\phi_a, \partial\phi_a)$ und die Wirkung

$$S = \int d^4x \mathcal{L} = \int dt \int d^3\mathbf{x} \mathcal{L}, \quad (2.2)$$

die einem Extremalprinzip unterliegt, was auf die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\delta S}{\delta \phi_i(x)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_i(x)} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_i(x))} \right) = 0 \quad (2.3)$$

führt. Bekannter Vertreter ist die Elektrodynamik (ED), in der die Dynamik elektrisch geladener Teilchen beschrieben wird.

Von einer *Symmetrie* eines Systems spricht man, falls S unter entsprechenden Transformationen invariant ist. So wird zum Beispiel als Manifestation des relativistischen Prinzips in Feldtheorien Invarianz unter Lorentztransformationen gefordert. Zu jeder Symmetrie gibt es nach dem Noethertheorem einen erhaltenen Ladungsstrom j^μ und eine erhaltene Ladung $Q = \int d^3\mathbf{x}j^0$, welche wiederum die Symmetrietransformation erzeugt. Durch die Inkorporation entweder der Symmetrie oder der erhaltenen Ladung wird die mathematische Form von \mathcal{L} bereits maßgeblich bestimmt. So ist \mathcal{L}_{ED} invariant unter einer U(1)-Phasentransformation $e^{ie\alpha}$ und die dadurch erhaltene Ladung kann mit der elektrischen Ladung identifiziert werden.

Prinzipiell lassen sich zwei Arten von Symmetrietransformationen unterscheiden, globale und lokale. Lokale hängen im Gegensatz zu globalen vom jeweiligen Raumzeitpunkt x ab. Invarianz unter ersteren Transformationen zwingt zur Einführung weiterer Felder in die Theorie, welche an die Materiefelder koppeln. Die Bewegungsgleichungen lassen gewisse Freiheiten in der Wahl dieser Felder zu, man kann sie „eichen“ (z.B. Coulomb-Eichung oder Lorentz-Eichung). Man spricht daher auch von *Eichtheorien* und *Eichfeldern*. Eichfelder lassen sich geometrisch als Paralleltransport von einem Raumzeitpunkt zu einem infinitesimal entfernten interpretieren. Die Forderung nach Eichinvarianz macht auch physikalisch Sinn, da die Eichfelder reale Entsprechungen haben. So kann in der ED das Eichfeld mit dem Photon identifiziert werden.

Wichtiger Vertreter von Symmetrietransformationen ist SU(N), die Gruppe der unitären $N \times N$ -Matrizen mit Determinante 1. Deren Generatoren genügen der Relation

$$[T_a, T_b] = if_{abc}T_c \quad (2.4)$$

mit Strukturkonstanten f_{abc} . Die Eichgruppe der ED ist die U(1).

Symmetrien können explizit gebrochen werden, bei der SU(N) zum Beispiel durch einen Massenterm der Eichfelder. Von spontaner Symmetriebrechung spricht man, wenn der Grundzustand des Systems nicht mehr invariant unter einer Symmetrietransformation ist. Aus diesem nichtverschwindenden Vakuumerwartungswert folgt die Existenz masseloser Teilchen, welche an den Strom j_μ koppeln (Nambu-Goldstone-Theorem). Der Vakuumerwartungswert heißt auch Ordnungsparameter und dient als Indikator für den Symmetriebruch. Die auftretenden Teilchen haben dieselben Eigenschaften wie die erhaltene Ladung, eine skalare Ladung erzeugt also skalare Teilchen.

Ebenso kann eine Symmetrie wiederhergestellt werden. Den Zustand eines Systems bezüglich einer bestimmten Symmetrie bezeichnet man als Phase, die Brechung bzw. Wiederherstellung dieser als Phasenübergang.

Bei Phasenübergängen gibt es drei Grundtypen. Als Phasenübergang erster Ordnung wird eine Unstetigkeit der Systemgröße X bezeichnet, als ein Übergang zweiter Ordnung entsprechend eine in deren Ableitungen bezüglich dem äußeren Parameter. Bei einem stetigen Übergang spricht man von einem Crossover.

Um den Zustand eines Systems bei bestimmten äußeren Bedingungen zu bestimmen, bietet sich das Potentialbild an. Der physikalische Grundzustand entspricht dem Zustand niedrigster Energie, dem Potentialminimum. Auf diese Weise lassen sich auch Phasenübergänge veranschaulichen.

Generisches Beispiel für einen Phasenübergang zweiter Ordnung (z.B. bei Magneten) ist das Potential

$$V(\phi) = -\frac{1}{2}\mu^2\phi^2 + \frac{1}{4}\lambda\phi^4. \quad (2.5)$$

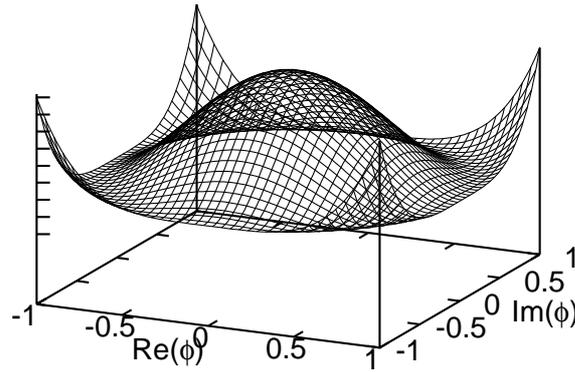


Abbildung 2.1: V aus 2.5 mit komplexem ϕ in der gebrochenen Phase mit $\mu^2 = \lambda = 5/4$.

Beim Übergang der Masse μ^2 von negativen zu positiven Werten entstehen aus dem Koordinatenursprung neue Minima bei $\phi_{\pm} = \pm\sqrt{\mu^2/\lambda}$. In welches Minimum sich das System begibt, ist in gewisser Weise zufällig. Durch die Wahl des Minimums wird die Symmetrie jedoch spontan gebrochen: Unterhalb der Curie-Temperatur besitzt der Magnet eine ausgezeichnete Nettomagnetisierung. Da das neue Minimum kontinuierlich aus dem alten entsteht, handelt es sich um einen Übergang zweiter Ordnung.

Wenn man $\phi = \phi_1 + i\phi_2$ komplex ansetzt, sieht man, dass V nur von dem Betrag von ϕ abhängt, V ist symmetrisch unter $U(1)$ -Phasentransformation $e^{i\alpha}$. In der gebrochenen Phase bricht der Grundzustand diese Symmetrie, V hat das Bild eines „Flaschenbodens“ (Abbildung 2.1). Durch Änderung der Phase kann das Minimum also beliebig rotiert werden.

Das Minimum lässt sich stets auf der positiven reellen Achse wählen. Dann gilt $\langle\phi_2\rangle = 0$ und es folgt, dass ϕ_2 keine Masse besitzt. Es handelt sich also um das Nambu-Goldstone-Teilchen, welches aufgrund der $U(1)$ -Brechung zu erwarten war. ϕ_1 wiederum hat den Erwartungswert $\langle\phi_1\rangle = \sqrt{\mu^2/\lambda}$ und ist somit der Ordnungsparameter für den Phasenübergang.

Der Übergang von einer Phase in eine andere kann auch durch eine andere Größe als den Ordnungsparameter angezeigt werden, zumal dieser nur bei spontaner Symmetriebrechung sinnvoll definiert ist: Die *Suszeptibilität* $\chi \sim \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$ zeigt je nach Übergangstyp charakteristisches Verhalten am Punkt des Übergangs, dem sogenannten *kritischen Punkt*. Bei Phasenübergängen zweiter Ordnung divergiert diese Größe am Übergangspunkt. In der Nähe des kritischen Punktes lässt sich die Theorie dann durch wenige charakteristische Größen, die kritischen Exponenten, beschreiben und einer bestimmten Universalitätsklasse zuordnen.

Zur Formulierung einer *Quantenfeldtheorie* (QFT) wird nun der von R. Feynman eingeführte Pfadintegralformalismus [32] benutzt. Das Pfadintegral kann als Integral über alle möglichen Feldkonfigurationen gesehen werden, die mit einem Phasenfaktor proportional ihrer Wirkung gewichtet werden. Hierzu betrachtet man die Amplitude $\langle\phi_b|e^{-iHt'}|\phi_a\rangle$ für eine (bosonische) Feldkonfiguration ϕ_a , die nach einer Zeit t' in ϕ_b übergeht. Nun teilt man das Zeitintervall t' in N Teilstücke auf und fügt zwischen jede der daraus resultierenden N Amplituden einen kompletten Satz an Eigenfunktionen ein, wobei jedoch zwischen solchen der Felder und ihren konjugierten Impulsen π_i abgewechselt wird.

Da $\langle \phi_{i+1} | \pi_i \rangle = \exp(i \int d^3 \mathbf{x} \pi_i(\mathbf{x}) \phi_{i+1}(\mathbf{x}))$ bekannt ist, lässt sich die Übergangsamplitude im Limes $N \rightarrow \infty$ als

$$\langle \phi_b | e^{-iHt'} | \phi_a \rangle = \int \mathcal{D}\pi \int_{\phi(\mathbf{x},0)=\phi_a(\mathbf{x})}^{\phi(\mathbf{x},t')=\phi_b(\mathbf{x})} \mathcal{D}\phi \exp \left\{ i \int_0^{t'} dt \int d^3 \mathbf{x} L \right\}$$

schreiben. Hierbei ist $\int \mathcal{D}\pi = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{i=1}^N d\pi_i / 2\pi \right)$. Vorteil dieser Methode ist, dass die Felder nicht korrespondenzartig in Operatoren umgewandelt werden, sondern ihre klassische Natur behalten. Analog gilt die Formel auch für Fermionen.

Bei der Quantisierung einer Eichtheorie stößt man bei den Eichfeldern auf Probleme. Deren Konfigurationen müssen auf jeweils einen Punkt eines jeden Orbits im Phasenraum eingeschränkt werden. Ansonsten würde man unendlich viele physikalisch gleichwertige Konfigurationen berücksichtigen und das Pfadintegral würde divergieren. Diese Einschränkung ist die Verallgemeinerung der Eichungen in der Elektrodynamik und führt auf die Faddeev-Popov-Geistfelder. Bei den Symmetrien der Theorie kann es ebenfalls zu Problemen während der Quantisierung kommen. Quanteneffekte können dafür sorgen, dass die Theorie nur dann eichinvariant renormierbar ist, wenn die Symmetrie gebrochen wird. Man bezeichnet dies als *Anomalie* und spricht davon, dass die Symmetrie die Quantisierung nicht überlebt hat [33].

Mit dem Pfadintegral lässt sich nun ein Zusammenhang zwischen einem statistischen und einem feldtheoretischen System herstellen. Hierzu betrachtet man den Fall $\phi_b = \phi_a$ in obigen Überlegungen. Das System kehrt also nach der Zeit t' in den ursprünglichen Zustand zurück. Nach einem Übergang vom Minkowski- zum Euklid'schen Raum via Wick-Rotation $t \rightarrow i\tau$ entspricht das Pfadintegral genau der Zustandssumme (2.1):

$$Z = \int \mathcal{D}\pi \int_{\phi(\mathbf{x},0)=\phi_a(\mathbf{x})}^{\phi(\mathbf{x},\beta)=\phi_a(\mathbf{x})} d\phi \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3 x L \right\} . \quad (2.6)$$

Das Zeitintervall t' wird hierbei mit der inversen Temperatur β identifiziert. Ein d -dimensionales statistisches System kann also durch eine $(d+1)$ -dimensionale euklidische Feldtheorie beschrieben werden mit kompakter „Zeitrichtung“ und Ausdehnung β . Das Entsprechende gilt für fermionische Felder. Für praktische Rechnungen geht man üblicherweise vom (\mathbf{x}, τ) - in den (\mathbf{p}, ω) -Raum über. Die Fourier-Reihe lautet dann

$$\phi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{n, \mathbf{p}} \exp\{i(\mathbf{p}\mathbf{x} + \omega_n \tau)\} \tilde{\phi}(\mathbf{p}, \omega_n) . \quad (2.7)$$

Die Periodizität in (2.6) hat Konsequenzen für mögliche Energien ω_n , die nur die diskreten Werte der *Matsubara-Moden* annehmen können, hier $\omega_n = 2n\pi/\beta$. Für Fermionen gelten aufgrund des Pauli-Prinzips antiperiodische Randbedingungen, entsprechend ergibt sich in diesem Fall $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$.

Bisher wurde nicht näher auf die Lagrangedichte \mathcal{L} eingegangen. Sie lässt sich typischerweise in einen freien Teil, welcher den kinetischen Term $\frac{1}{2}(\partial_\mu \phi)^2$ und den Massenterm $\frac{1}{2}m^2 \phi^2$ beinhaltet, sowie einen Wechselwirkungsteil \mathcal{L}_{WW} zerlegen. Im Allgemeinen kann für eine Theorie mit Wechselwirkungen das Pfadintegral nicht geschlossen berechnet werden. In diesem Fall ist es üblich, das Exponential der Wirkung nach der

Kopplung hin zu entwickeln („*Störungsrechnung*“). Die dabei auftretenden mathematischen Ausdrücke lassen sich in graphischen Regeln, sogenannten *Feynmandiagrammen*, ausdrücken. Der Feynmanpropagator für ein freies Feld ϕ ist

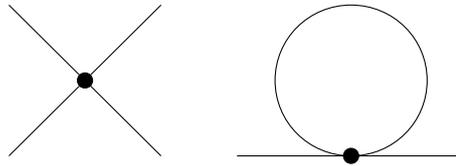
$$\Delta_F(x - y) \equiv \langle 0 | T \phi(x) \phi(y) | 0 \rangle_0, \quad (2.8)$$

welcher durch den Feynmangraphen



dargestellt wird. Δ_F kann interpretiert werden als ein Teilchen, welches am Ort x erzeugt wird, zu y propagiert und dort wieder vernichtet wird. Der Zeitordnungsoperator T sorgt dafür, dass die Kausalität erhalten ist.

Auch bei wechselwirkenden Feldern tritt Δ_F auf. Das Teilchen propagiert über ihn zum Wechselwirkungspunkt (auch Vertex genannt), interagiert und propagiert weiter, z.B. in solchen Graphen (ϕ^4 -Theorie):



Die von x, y, \dots ausgehenden Linien nennt man äußere Linien, die anderen entsprechend innere Linien. Da beim ersten Graph keine geschlossenen inneren Linien auftreten, wird er Baumgraph genannt, den zweiten Graph nennt man Schleifendiagramm.

Physikalisch wichtig ist der Propagator Δ in der vollen Theorie. Die Masse des Teilchens entspricht nicht der „nackten“ Masse, welche im Massenterm auftritt. Durch Vakuumfluktuationen wird diese verändert. Diese Fluktuationen entsprechen gerade den Schleifendiagrammen. Ausgedrückt werden diese Beiträge in der Selbstenergie Σ :

$$\Sigma = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots \equiv \text{diagram 3} \quad (2.9)$$

Der volle Propagator kann dann wie folgt geschrieben werden

$$\begin{aligned} \Delta &= \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots \\ &= (1 + \Delta_F \Sigma)^{-1} \Delta_F \end{aligned} \quad (2.10)$$

und die gesamte Masse des Teilchens („Konstituentenmasse“) ist $M = m_0 + \Sigma$.

Man kann \mathcal{L} auch bezüglich des Potentialbildes interpretieren. Der Massenterm ist das einfachst mögliche Potential des harmonischen Oszillators. Durch \mathcal{L}_{WW} kommen nun weitere Terme hinzu, im Beispiel der ϕ^4 -Theorie resultiert dies in (2.5). Auf klassischer Ebene wäre das Potential nun bestimmt. Genau wie die Masse wird sich das Potential durch Quanteneffekte jedoch verändern. Man kann ein effektives Potential

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{klass}} + \frac{1}{2} \hbar \int \frac{d^4 \mathbf{k}}{(2\pi)^4} \ln \det [i\Delta^{-1}] + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (2.11)$$

angeben, welches diese Effekte berücksichtigt (hierzu wurde \hbar explizit ausgeschrieben). Der erste Term ist das klassische Potential, im zweiten stehen Einschleifenbeiträge, die Determinante läuft über alle Freiheitsgrade außer der Raumzeit. Höhere Schleifenbeiträge sind nicht aufgeführt.

Bei Berechnungen von Schleifendiagrammen kommt es oft zu Divergenzen im ultravioletten oder infraroten Bereich. Um diese zu umgehen, versucht man die Theorie geschickt zu *renormieren*, so dass diese Divergenzen anschließend nicht mehr auftreten. Hierzu werden die auftretenden Integrale zuerst *regularisiert* und die verschiedenen Größen anschließend renormiert.

Die einfachste Regularisierungsmethode ist die Einführung eines Cut-Offs in der Integration. Dieser darf in der renormierten Theorie in den Endergebnissen dann nicht mehr auftreten. Ein Beispiel für einen ultravioletten Cut-Off ist die *Gitterregularisierung*. Hierbei wird der Raum ähnlich einem Kristall als symmetrisches Gitter mit Gitterabstand a diskretisiert.

2.2 SU(N)-Yang-Mills-Theorie: Der Polyakovloop

Nach C. N. Yang und R. L. Mills (YM) ist eine Eichtheorie ohne Materiefelder, eine sogenannte reine Eichtheorie, benannt [34]. Bei endlicher Temperatur ergibt sich deren Wirkung zu

$$\mathcal{S}_{\text{YM}} = \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} \left\{ -\frac{1}{4} \text{Tr} \mathcal{F}_{\mu\nu}^2 \right\},$$

mit den SU(N)-Eichfeldern $A_\mu = A_\mu^a T_a$ und dem lorentzinvarianten Feldstärketensor $\mathcal{F}_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf_{abc} A_\mu^b A_\nu^c$. Für $N > 1$ verschwindet der letzte Term nicht, $N=1$ liefert den QED-Eichterm. Natürlich ist \mathcal{S}_{YM} eichinvariant, es gibt aber noch weitere interessante Symmetrien.

Aufgrund der Spur in der Zustandssumme ist das Eichfeld periodisch in (euklidischer) Zeitrichtung:

$$A_\mu(\mathbf{x}, \tau + \beta) = A_\mu(\mathbf{x}, \tau).$$

Bei Eichtransformationen, welche gemäß $A_\mu \rightarrow U(A_\mu + \partial_\mu)U^\dagger$ und $\mathcal{F}_{\mu\nu} \rightarrow U\mathcal{F}_{\mu\nu}U^\dagger$ transformieren ($U \in \text{SU}(N)$), müssen diese Randbedingungen ebenfalls erfüllt sein, was bedeutet, dass die Transformationen selbst periodisch sein müssen. Hierbei ergibt sich allerdings noch eine weitere Möglichkeit, die Periodizität bis auf einen „Twist“ $U(\mathbf{x}, \tau + \beta) = h U(\mathbf{x}, \tau)$ mit einer konstanten Matrix $h \in \text{SU}(N)$ ($h = \mathbb{1}$ korrespondiert zur normalen Eichtransformation). Eichinvarianz verlangt, dass h mit allen SU(N)-Matrizen vertauscht, also aus dem Zentrum von SU(N) stammt:

$$\mathbb{Z}(N) \equiv \left\{ h = z\mathbb{1}, z = \exp(2\pi i n/N), n \in (1, 2, \dots, N) \right\}$$

\mathcal{S}_{YM} ist zentrumsymmetrisch und $\mathbb{Z}(N)$ offensichtlich eine globale Symmetrie. Man muss beachten, dass aufgrund ihrer antiperiodischen Randbedingungen Quarks die $\mathbb{Z}(N)$ -Symmetrie explizit brechen. Aber auch ohne (dynamische) Quarks lassen sich Schlussfolgerungen ziehen. Ein im System platziertes, unendlich schweres (statisches)

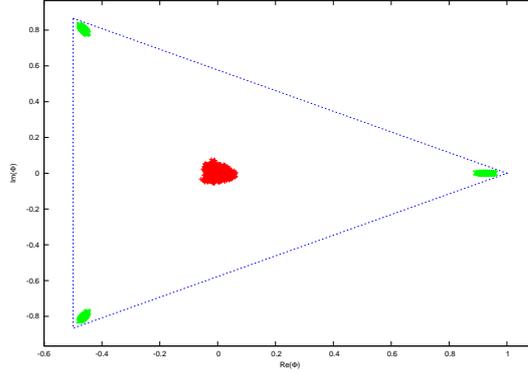


Abbildung 2.2: Der Polyakovloop aus Gittersimulationen [35] ($N_c = 3$).
 Rot: Confinementphase, Grün: Deconfinementphase.

Quark wird beschrieben durch eine um die Zeitrichtung gewundene Wilson-Linie, den Polyakov-Loop

$$\Phi = N^{-1} \text{Tr} L = N^{-1} \text{Tr} \mathcal{P} \exp \left\{ i \int_0^\beta d\tau A_4(\mathbf{x}, \tau) \right\} \quad (2.12)$$

mit dem Pfadordnungsoperator \mathcal{P} . (Genau genommen ist dieses Φ nur die Spur des eigentlichen Polyakovloops. Im Weiteren wird dies jedoch nicht unterschieden.) Der Erwartungswert

$$\langle \Phi(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A \Phi \exp(-\mathcal{S}_{\text{YM}}(A)) = e^{-\beta \Delta F_q(\mathbf{x})}$$

misst die freie Energie ΔF_q des statischen Quarks, also die zum Einbringen ins System benötigte Energie. Physikalisch ist ein einzelnes Quark als farbtragendes Objekt nicht möglich, solange Confinement gilt, bei tiefen Temperaturen. Dementsprechend ist in diesem Fall $\Delta F_q = \infty$ und $\langle \Phi \rangle = 0$. Im Deconfinement, also bei hohen Temperaturen, gilt hingegen $\Delta F_q < \infty$, und damit $\langle \Phi \rangle \neq 0$. Φ transformiert nichttrivial unter $\mathbb{Z}(N)$ -Transformationen und bricht so bei nichtverschwindendem Erwartungswert die $\mathbb{Z}(N)$ -Symmetrie spontan. Daraus entstehen N degenerierte Minima. Somit ist der Erwartungswert des Polyakov-Loops ein Ordnungsparameter für den Confinement-/ Deconfinementübergang in reiner Eichtheorie. Es gilt:

$$\langle \Phi \rangle \xrightarrow{T < T_c} 0 \quad \langle \Phi \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 1. \quad (2.13)$$

Gittersimulationen von \mathcal{S}_{YM} bestätigen dieses Bild, Abbildung 2.2 zeigt ein Beispiel. Man sieht deutlich, wie Φ beim Phasenübergang von Null zu einem von drei äquivalenten Minima übergeht. Diese liegen jeweils um einen Winkel $\frac{2\pi}{3}$ voneinander entfernt. Der Übergang ist erster Ordnung bei $T_c \approx 270$ MeV [6].

Die explizite Brechung der $\mathbb{Z}(N)$ -Symmetrie durch dynamische Quarks ergibt physikalisch sofort Sinn, da für jedes Quark ein Antiquark zur Verfügung steht, um die Farbneutralität wiederherzustellen. Obwohl $\langle \Phi \rangle$ in diesem Fall kein exakter Ordnungsparameter mehr ist, kann er als Indikator weiter verwendet werden.

Auch wenn keine $Z(N)$ -Symmetrie mehr vorliegt, kann man noch Überreste von ihr finden. A. Roberge und N. Weiss untersuchten 1986 eine $SU(N)$ -Eichtheorie mit Quarks und zusätzlich einem rein imaginären chemischen Potential $\mu = i\theta/\beta$ [5]. Sie fanden unter den Transformationen

$$\begin{aligned} A_\mu &\longrightarrow UA_\mu U^{-1} - \frac{i}{g} (\partial_\mu U) U^{-1} \\ \psi &\longrightarrow U\psi \\ \theta &\longrightarrow \theta + \frac{2\pi k}{N} \end{aligned} \tag{2.14}$$

eine Periode $2\pi/N$: $Z(\theta) = Z(\theta + 2\pi k/N)$, $k \in \mathbb{N}$. Die Transformationen U sind dabei gerade aus dem Zentrum von $SU(N)$ und die Periodizität somit ein Überbleibsel der $Z(N)$ -Symmetrie in reiner Eichtheorie. Diese Symmetrie wird Roberge-Weiss-Symmetrie (RW-Symmetrie) und (2.14) erweiterte $Z(N)$ -Transformation genannt. Auch die zwei unterschiedlichen Phasen lassen sich wiederfinden. Oberhalb einer kritischen Temperatur T_c weisen thermodynamische Größen wie Ω oder auch Φ Unstetigkeiten bei $\theta = (2k+1)\pi/N$ auf, unterhalb nicht. Der Übergang zwischen beiden Phasen wird Roberge-Weiss (RW)-Phasenübergang genannt (siehe Abbildung 1.2). Auch hier spielt die $Z(N)$ -Symmetrie hinein: Oberhalb von T_c gibt es N degenerierte Minima, analog zur reinen Eichtheorie. Die Diskontinuitäten sind gerade die Übergänge zwischen diesen Minima.

2.3 Quantenchromodynamik

Die QCD beschreibt die starke Wechselwirkung der farbtragenden Quarks. Sie ist eine $SU(N_c)$ -Eichtheorie mit Fermionfeld ψ , welches die Quarks in N_f -Flavours beinhaltet. Austauscheteilchen der Wechselwirkung sind die Gluonen, welche mit den Eichfeldern A_μ identifiziert werden. Die Lagrangedichte ergibt sich zu

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = -\frac{1}{4} \mathcal{F}_{\mu\nu}^a \mathcal{F}_a^{\mu\nu} + \bar{\psi} (i\not{D} - M) \psi . \tag{2.15}$$

Die Massenmatrix M ist diagonal im Flavour-Raum. Die Eichfelder koppeln mit Kopplungsstärke g an die Quarks über die kovariante Ableitung

$$\begin{aligned} (D_\mu)_{cc'} &= \partial_\mu \delta_{cc'} - \frac{ig}{2} (\lambda_a)_{cc'} A_\mu^a \\ &(\mu, \nu = 0, \dots, 3; a, b, c = 1, \dots, (N_c^2 - 1); c, c' = 1, \dots, N_c) . \end{aligned} \tag{2.16}$$

Die Unschärferelation $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ erlaubt es, dass Teilchenpaare für eine kurze Zeit „aus dem Nichts“ entstehen und wieder verschwinden. Analog zur QED kann man sich dies als Wolke aus Quarks und Gluonen vorstellen. Anders als die neutralen Photonen tragen die Gluonen jedoch selbst Farbladung, das heißt sie wechselwirken auch miteinander. Je näher man also experimentell an ein Quark herangeht, desto stärker verzerren diese Vakuumfluktuationen das Ergebnis. Diese Tatache ist dafür verantwortlich, dass die Konstituentenmasse des Quarks erheblich höher ist als diejenige aus der Massenmatrix.

Die QCD hat verschiedene Symmetrien, die teilweise in der Natur realisiert sind. Eine Übersicht ist in Tabelle 2.1 gegeben. Die Symmetriegruppe lautet

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{QCD} &= \text{SU}_V(N_f) \otimes \text{SU}_A(N_f) \otimes \text{U}_V(1) \otimes \text{U}_A(1) \otimes \text{SU}_c(N_c) \\ &= [\text{SU}(N_f) \otimes \text{U}(1)]_L \otimes [\text{SU}(N_f) \otimes \text{U}(1)]_R \otimes \text{SU}_c(N_c).\end{aligned}\quad (2.17)$$

Letztere Formulierung gilt für links- und rechtshändige Fermionen, die Weyl-Spinoren $\psi_{L,R} = (1 \pm \gamma_5)\psi$. Diese sind die Projektionen auf den rechts- bzw. linkshändigen Anteil der Fermionen. Von chiraler Symmetrie spricht man, wenn sich ψ_L und ψ_R unabhängig voneinander transformieren lassen. Ein Massenterm mischt diese und bricht die Symmetrie somit explizit.

Experimentell lassen sich diese Symmetrien anhand des Spektrums der Hadronen, also Bindungszuständen aus Quarks, bestätigen; man findet sie in den Quantenzahlen wieder. Bei den Hadronen sind nicht alle Kombinationen von Quarks erlaubt; damit ein Farbsingulett vorliegt, kann man beispielsweise ein Quark mit einem Antiquark (Mesonen) oder drei Quarks (Baryonen) zusammenfügen, aber nicht vier Quarks.

Quarks unterscheiden sich stark in ihren Massen. u - und d -Quarks sind ungefähr gleich schwer (~ 5 MeV). Die leichtesten Mesonen sind daher die Pionen π^+ ($|\bar{d}u\rangle$), π^- ($|\bar{u}d\rangle$) und π^0 ($\frac{1}{\sqrt{2}}\{|\bar{u}u\rangle + |\bar{d}d\rangle\}$). Sie haben eine Masse von ca. 135 MeV. Nimmt man das s -Quarks hinzu, bekommt man weitere Mesonen, die sogenannten Kaonen K^- , K^+ , \bar{K}^0 und K^0 mit Massen von ungefähr 485 MeV. Hierbei handelt es sich um pseudoskalare Teilchen mit Spin 0, da man jeweils Quarks mit entgegengesetztem Spin kombiniert hat. Haben sie denselben Spin, erhält man analog die Vektormesonen ρ und K^* mit Spin 1. Beide haben Parität -1 , es gibt jedoch keine beobachteten Gegenstücke mit positiver Parität. Diese Tatsache entspricht der Brechung der axialen $\text{U}_A(1)$ -Symmetrie. Lange Zeit konnte dieser Umstand theoretisch nicht erklärt werden, bis schließlich gezeigt werden konnte, dass aufgrund von Instantoneffekten eine Anomalie auftritt und die Symmetrie die Quantisierung nicht überlebt [33]. Abbildung 2.3 (links) zeigt das Oktett der pseudoskalaren Mesonen, die aus u -, d - und s -Quarks aufgebaut sind.

Besonderes Augenmerk gilt der chiralen und der Farbsymmetrie unter Variation der Quarkmassen. Sowohl für massive als auch für masselose Quarks ist die chirale Symmetrie bei kleinen Temperaturen gebrochen. Ihr Ordnungsparameter ist das Quarkkondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$. Sie wird in einem Übergang 2. Ordnung (masselos) bzw. einem Crossover (massiv) wiederhergestellt. Die chirale Symmetriegruppe ist die $\text{SU}_V(N_f) \otimes \text{SU}_A(N_f)$, die im masselosen Fall spontan zu $\text{SU}_V(N_f)$ gebrochen wird. Entsprechend gibt es dort $N_f^2 - 1$ masselose Nambu-Goldstone-Bosonen, welche z.B. für $N_f = 2$ mit den Pionen identifiziert werden können.

| Symmetrie | Name | Vorkommen im Experiment |
|---|--------------|---|
| $\text{SU}_V(N_f)$ | Isospin | \approx erhalten für $N_f = 2$ ($M \neq 0$) |
| $\text{U}_V(1)$ | Baryonenzahl | immer erhalten |
| $\text{U}_s(1)$ | Strangeness | erhalten bei starker WW |
| $\text{SU}_V(N_f) \otimes \text{SU}_A(N_f)$ | Chiralität | erhalten für $M = 0$ |
| $\text{U}_A(1)$ | Axial | nicht erhalten |
| $\text{SU}_c(N_c)$ | Farbe | immer erhalten |

Tabelle 2.1: Symmetrien der QCD.

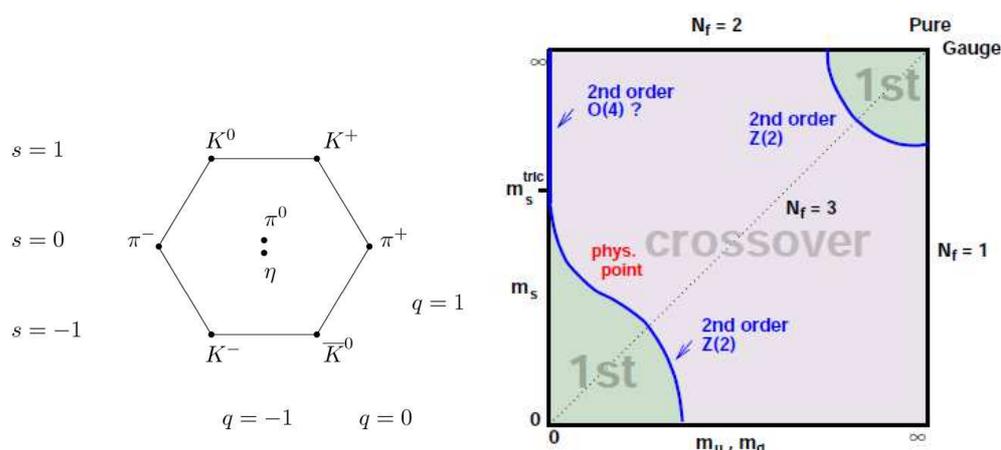


Abbildung 2.3: Links: Mesonen-Oktet aus u-, d- und s-Quarks mit elektrischer Ladung q und Strangeness s [www.absoluteastronomy.com/topics/Eightfold_way_(physics)]. Rechts: Qualitatives Phasendiagramm der QCD für $N_f = 2 + 1$ bei $\mu = 0$ (aus [1]).

Die Farbsymmetrie manifestiert sich im Confinement. Eine theoretische Erklärung liefert die Renormierungsgruppentheorie. Man erhält einen Ausdruck für die effektive Stärke α_s der Kopplung, der vom Impulsbetrag Q abhängt („laufende Kopplung“). Für große Q , also kleine Abstände, ist $\alpha_s \ll 1$, für kleine Q (große Abstände) allerdings nicht. Somit ziehen sich zwei Quarks umso stärker an, je weiter man sie voneinander entfernt (asymptotische Freiheit), was der Phase des Confinement entspricht. Große Q entsprechen allerdings großen Energien, das heißt, dass für die Kopplung normalerweise $g \approx 1$ gilt und Störungsrechnung somit sinnlos ist. Die Art des Übergangs von Confinement zu Deconfinement hängt von der Anzahl der Flavours ab. Im Fall unendlich schwerer Quarks ist er, wie schon erwähnt, erster Ordnung. Bei kleiner werdenden Massen wird ein Bereich von Übergängen erster Ordnung verlassen und er wird zu einem Crossover. Begrenzt wird dieser Bereich durch eine Linie von Übergängen zweiter Ordnung, siehe hierzu beispielsweise [36].

Je nachdem, ob die Quarks gleich oder verschieden schwer sind, erhält man unterschiedliches Verhalten im Bereich kleiner Quarkmassen. Im physikalischen Fall von zwei leichten und einem schweren Quark ($N_f = 2 + 1$) hängt es von der Masse des schweren Quarks ab, ob wiederum in einen Bereich mit Übergängen erster Ordnung eingetreten wird, gleiches gilt bei drei gleich schweren Quarks ($N_f = 3$). Bei zwei gleich schweren Quarks ($N_f = 2$) endet der Crossoverbereich im chiralen Übergang zweiter Ordnung bei verschwindenden Quarkmassen (obwohl auch hier ein Bereich von Übergängen erster Ordnung nicht völlig ausgeschlossen ist, siehe [37]). Zusammengefasst ist dieses Verhalten im Phasendiagramm 2.3 (rechts). Der physikalische Punkt liegt in der Crossoverregion. Wenn man nun ein chemisches Potential anschaltet, beschreibt die Linie mit Übergängen zweiter Ordnung eine aus der Bildebene herauskommende Fläche. Es hängt nun davon ab wie diese Fläche gekrümmt ist, ob der Bereich erster Ordnung wächst oder nicht und damit auch, ob der physikalische Punkt bei einem gewissen μ in diesen Bereich fällt. Wäre dies der Fall, so hätte man einen Hinweis auf einen kritischen Punkt im QCD-Phasendiagramm erhalten. Es gibt aber Ergebnisse, die in eine andere Richtung weisen (vgl. [1]).

3 Effektive Theorien für QCD

In der QCD ist die Kopplung stark und Störungstheorie in der Kopplung somit meistens nicht sinnvoll. Um in solchen Fällen ein Gefühl für die volle Theorie zu bekommen, stellt man typischerweise eine *effektive Theorie* auf. Diese beinhaltet in gewissem Umfang dieselben Eigenschaften, ist aber mathematisch handhabbarer als die ursprüngliche Theorie. Durch Anpassen der Parameter an experimentelle Ergebnisse kann die effektive dann mit der ursprünglichen Theorie abgeglichen werden. Schwere Quarks können zum Beispiel in guter Näherung nichtrelativistisch behandelt werden und man kann ein wasserstoffähnliches Problem formulieren (Quarkonium). Es geht aber auch andersherum. Da die c-, t- und b-Quarks viel schwerer als die u-, d- und s-Quarks sind, kann man sie bei Temperaturen weit unterhalb von m_c getrost vernachlässigen. Entsprechend werden in dieser Arbeit nur die Fälle

$$N_f = 2: \quad \psi = \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad N_f = 3: \quad \psi = \begin{pmatrix} u \\ d \\ s \end{pmatrix}$$

betrachtet. Des Weiteren sind m_u und m_d so klein im Vergleich zu m_s , dass stets der Grenzfall $m_u = m_d \equiv m_0 \ll m_s$ betrachtet wird. Mit diesem eingeschränkten Flavourinhalt wird nun zunächst eine effektive Theorie zur Beschreibung der aus leichten Quarks konstruierten Mesonen entwickelt. Danach wird der entgegengesetzte Grenzfall unendlich schwerer Quarks betrachtet. Diese werden durch den Polyakovloop beschrieben, für welchen ebenfalls eine effektive Theorie aufgestellt wird.

Eine Übersicht bieten [38] und [39] sowie [40].

3.1 Nambu-Jona-Lasinio-Modell (NJL-Modell)

Bei hohen Temperaturen ist es möglich, QCD störungstheoretisch zu behandeln. Ein Quarkstrom J_i^μ wechselwirkt dann mit einem zweiten Strom über den Austausch eines Gluon,

$$\mathcal{L}_{int} \sim J_i^\mu(x) g^2 D_{\mu\nu}^{ij}(x, y) J_j^\nu(y). \quad (3.1)$$

Die Wechselwirkung ist nichtlokal, sie wird mittels des Gluonpropagators D übertragen. Wenn die Temperatur nun erniedrigt wird, verliert die Störungstheorie ihre Gültigkeit. Durch einige Annahmen können die Gluonen jedoch „ausintegriert“ werden. Gittersimulationen zeigen, dass Gluonen in der hadronischen Phase typischerweise nur über eine sehr kleine Entfernung (≈ 0.2 fm) wirken, was einer Impulsskala λ von ca. 1 GeV entspricht. Wenn nun der Impulsbereich der Quarks unterhalb dieser Skala liegt, kann man die Wechselwirkungen durch eine lokale Kopplung zwischen den beiden Strömen approximieren:

| Symmetrie | Transformation | Invariante Wechselwirkung | |
|-------------|---|---|--|
| $SU_V(N_f)$ | $\psi \rightarrow e^{-i\tau\omega/2}\psi$ | $\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}e^{i\tau\omega/2}$ | $\bar{\psi}\psi, \bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ |
| $U_V(1)$ | $\psi \rightarrow e^{-i\alpha}\psi$ | $\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}e^{i\alpha}$ | $\bar{\psi}\psi, \bar{\psi}i\gamma_5\tau\psi, \bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ |
| $SU_A(N_f)$ | $\psi \rightarrow e^{-i\tau\theta\gamma_5/2}\psi$ | $\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}e^{-i\tau\theta\gamma_5/2}$ | $(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\tau\psi)^2, \bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ |
| $U_A(1)$ | $\psi \rightarrow e^{-i\beta\gamma_5}\psi$ | $\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}e^{-i\beta\gamma_5}$ | $\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ |

Tabelle 3.1: Mögliche Wechselwirkungen, die die Symmetrien der QCD erhalten (für $N_f = 2$). Für $N_f = 3$ müssen die Pauli- durch die Gell-Mann-Matrizen ersetzt werden.

$$\mathcal{L}_{int} \sim G_c J_i^\mu(x) J_j^\nu(x) . \quad (3.2)$$

Die Kopplung g wird hierbei in eine effektive Kopplung $G_c \sim g^2 \lambda^{-2}$ absorbiert. Hierdurch wird die lokale $SU(N_c)$ -Eichinvarianz durch eine globale ersetzt. Durch eine Fierz-Transformation lassen sich die Ströme in Quark-Antiquark-Interaktionen umwandeln. Aus dem Transformationsverhalten der Quarks ergeben sich dann mögliche Wechselwirkungen, welche die Symmetrien der QCD erhalten (Tabelle 3.1). Wie die adjungierten Spinoren transformieren, kann man sich an der chiralen Transformation verdeutlichen:

$$e^{i\tau\theta\gamma_5/2}\bar{\psi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\tau\theta\gamma_5/2)^n}{n!} \psi^\dagger \gamma_0 \stackrel{(A.4)}{=} \psi^\dagger \gamma_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\tau\theta\gamma_5/2)^n}{n!} = \bar{\psi} e^{-i\tau\theta\gamma_5/2} .$$

Hiermit lässt sich zeigen, dass $\bar{\psi}\psi$ und $\bar{\psi}i\gamma_5\tau_i\psi$ unter $SU_V(N_f)$ -Transformationen wie folgt transformieren:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}\psi &\rightarrow \bar{\psi}\psi \cos \theta - \bar{\psi}i\gamma_5\tau_i\theta/\theta\psi \sin \theta \\ \bar{\psi}i\gamma_5\tau_i\psi &\rightarrow \bar{\psi}i\gamma_5\tau_i\psi + \bar{\psi}\psi(\theta/\theta)_i \sin \theta - \bar{\psi}i\gamma_5\tau\theta/\theta\psi(\theta/\theta)_i(1 - \cos \theta) , \end{aligned} \quad (3.3)$$

wobei $\theta = |\theta|$ ist. Der Ausdruck $(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\tau\psi)^2$ ist dann invariant, er entspricht einer 4-Quark-Wechselwirkung.

Man sieht weiterhin, dass der Term $\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ wegen $\gamma_5\gamma_\mu = -\gamma_\mu\gamma_5$ stets möglich ist, ebenso wie ein kinetischer Term $\bar{\psi}\not{\partial}\psi$.

Auf diese Weise wurde 1961 von Y. Nambu und G. Jona-Lasinio ein effektives Modell (NJL-Modell) zur Beschreibung des chiralen Übergangs zweier Flavours aufgestellt [29]. Die Symmetriegruppe ist $\mathcal{G}_{NJL} = SU_V(N_f) \otimes SU_A(N_f) \otimes U_V(1)$, wobei die globale $SU(N_c)$ -Farbsymmetrie vernachlässigt wurde. Die in QCD durch die Anomalie verhinderte axiale Symmetrie ist ebenfalls nicht vorhanden. Es ist

$$\mathcal{L}_{NJL} = \bar{\psi}i\not{\partial}\psi + \mathcal{L}_{WW} [+ \mathcal{L}_M] . \quad (3.4)$$

Der (ursprünglich nicht vorhandene) Massenterm \mathcal{L}_M bricht die chirale Symmetrie explizit. Im Wechselwirkungsterm \mathcal{L}_{WW} stehen Produkte der unter \mathcal{G}_{NJL} invarianten Wechselwirkungsterme.

Die obige 4-Quark-Wechselwirkung ist der einfachsten Fall. Sie lässt sich wie folgt um-

schreiben:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_{WW} &= \mathcal{L}_{4q} = G_s [(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}\psi)^2] \\
 &= \frac{1}{2}G_s \left[(\bar{\psi}\boldsymbol{\tau}^i\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}^i\psi)^2 \right] + \\
 &\quad \frac{1}{2}G_s \left[(\bar{\psi}\psi)^2 - (\bar{\psi}\boldsymbol{\tau}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}\psi)^2 - (\bar{\psi}i\gamma_5\psi)^2 \right] \\
 &= \frac{1}{2}G_s \left[(\bar{\psi}\boldsymbol{\tau}^i\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}^i\psi)^2 \right] + G_s \left[\det \bar{\psi}(1 + \gamma_5)\psi + \det \bar{\psi}(1 - \gamma_5)\psi \right] \\
 &= \mathcal{L}_{\text{sym}}^{N_f=2} + \mathcal{L}_{\text{det}}^{N_f=2} \quad (i = 0, \dots, 3) .
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Hierbei zeigt τ_i die jeweilige Komponente von $\boldsymbol{\tau}$ an. Mit der nullten Komponente ist stets die Einheitsmatrix gemeint. Die Determinante wirkt im Flavourraum und die Matrix $\bar{\psi}(1 \pm \gamma_5)\psi$ ist wie folgt zu verstehen:

$$\bar{\psi}(1 \pm \gamma_5)\psi = \begin{pmatrix} \bar{u}(1 \pm \gamma_5)u & \bar{u}(1 \pm \gamma_5)d \\ \bar{d}(1 \pm \gamma_5)u & \bar{d}(1 \pm \gamma_5)d \end{pmatrix} \tag{3.6}$$

Das Umschreiben ist nur formaler Natur, bietet allerdings die Möglichkeit zum Vergleich des Modells mit drei Flavours. Der Determinantenterm wurde von 't Hooft vorgeschlagen [33], um die $U_A(1)$ -Symmetrie zu brechen, die bei einer Wechselwirkung analog zu obigem \mathcal{L}_{4q} vorhanden wäre. Es ist also

$$\mathcal{L}_{\text{sym}}^{N_f=3} = \frac{1}{2}G_{s4} \left[(\bar{\psi}\lambda^i\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\lambda^i\psi)^2 \right] \quad (i = 0, \dots, 8) \tag{3.7}$$

$$\mathcal{L}_{\text{det}}^{N_f=3} = G_{s6} \left[\det \bar{\psi}(1 + \gamma_5)\psi + \det \bar{\psi}(1 - \gamma_5)\psi \right] . \tag{3.8}$$

Das Ausführen der Determinante führt auf eine zusätzliche 6-Quark-Wechselwirkung. Daher wird hier auch eine weitere Kopplungskonstante G_{s6} eingeführt. \mathcal{L}_{det} induziert Wechselwirkungen, welche Quarks verschiedener Flavours mischen. Bei $N_f = 2$ hat dies wegen $m_u \approx m_d$ keine Konsequenzen. Bei $N_f = 3$ jedoch ist $m_s \gg m_0$ und es treten zusätzliche Terme auf.

In dieser Arbeit werden in den beiden Flavourfällen folgende Wechselwirkungen berücksichtigt:

$N_f = 2$

$$\mathcal{L}_{4q} = G_s [(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}\psi)^2] \tag{3.9}$$

$$\mathcal{L}_{VV} = -G_v (\bar{\psi}\boldsymbol{\gamma}_\mu\psi)^2 \tag{3.10}$$

$$\mathcal{L}_{8q} = G_{s8} [(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}\psi)^2]^2 \tag{3.11}$$

$N_f = 3$

$$\mathcal{L}_{4q} = G_{4q} \left[(\bar{\psi}\lambda^i\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\lambda^i\psi)^2 \right] \quad (i = 0, \dots, 8) \tag{3.12}$$

$$\mathcal{L}_{VV} = -G_V (\bar{\psi}\boldsymbol{\gamma}_\mu\psi)^2 \tag{3.13}$$

$$\mathcal{L}_{6q} = G_{6q} \left[\det \bar{\psi}(1 + \gamma_5)\psi + \det \bar{\psi}(1 - \gamma_5)\psi \right] \tag{3.14}$$

3.2 Mean-Field-Approximation

In einer Mean-Field-Approximation (MFA) werden die Wechselwirkungen eines Feldes durch die Wechselwirkungen mit dem Erwartungswert σ des Feldes ersetzt. Fluktuationen $\Delta = \bar{\psi}\psi - \sigma$ um den Erwartungswert herum werden hierbei vernachlässigt. Dies stellt oft bereits eine gute Näherung der vollen Dynamik dar.

$\mathbf{N}_f = 2$ Da u- und d-Flavour nicht unterscheidbar sind, setze $\langle \bar{\psi}_u \psi_u + \bar{\psi}_d \psi_d \rangle = \langle \bar{\psi} \psi \rangle = \sigma$ (skalar), $\langle \bar{\psi} i \gamma_5 \boldsymbol{\tau} \psi \rangle = \boldsymbol{\pi}$ (pseudoskalar) und $n = \langle \bar{\psi} \gamma_0 \psi \rangle$ (vektorwertig). Die räumlichen Erwartungswerte $\langle \bar{\psi} \gamma_i \psi \rangle$ ($i = 1, \dots, 3$) verschwinden [16]. σ und $\boldsymbol{\pi}$ entsprechen den Mesonen und n wird mit der Quarkzahldichte identifiziert. In MFA werden die Wechselwirkungen wie folgt modifiziert:

$$\begin{aligned} (\bar{\psi}\psi)^2 &\rightarrow (\Delta + \sigma)^2 \approx 2\Delta\sigma + \sigma^2 = -\sigma^2 + 2\sigma\bar{\psi}\psi \\ (\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}\psi)^2 &\rightarrow (\Delta + \boldsymbol{\pi})^2 \approx 2\Delta\boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\pi}^2 = -\boldsymbol{\pi}^2 + 2\bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}\psi\boldsymbol{\pi} \\ (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)^2 &\rightarrow (\Delta + n)^2 \approx 2\bar{\psi}\gamma_0\psi n - n^2 \end{aligned}$$

Einsetzen in \mathcal{L}_{8q} ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{8q} &\rightarrow -3G_{s8} (\boldsymbol{\pi}^2 + \sigma^2)^2 \\ &\quad + 4G_{s8} [(\sigma^3 + \sigma\boldsymbol{\pi}^2) \bar{\psi}\psi + (\boldsymbol{\pi}^3 + \sigma^2\boldsymbol{\pi}) \bar{\psi}i\gamma_5\boldsymbol{\tau}\psi] . \end{aligned} \quad (3.15)$$

Als Lagrangian in MFA ergibt sich so

$$\mathcal{L}_{\text{MFA}}^{\mathbf{N}_f=2} = \bar{\psi}(i\cancel{\partial} - \gamma_0\Sigma_V - M)\psi - U \quad (3.16)$$

mit $U = G_s(\sigma^2 + \boldsymbol{\pi}^2) - G_v n^2 + 3G_{s8}(\sigma^2 + \boldsymbol{\pi}^2)^2$, Konstituentenmasse $M = m_0 + \Sigma_s$, $\Sigma_s = -2G_s(\sigma + i\gamma_5\boldsymbol{\pi}) - 4G_{s8}(\sigma^3 + \sigma\boldsymbol{\pi}^2 + i\gamma_5(\boldsymbol{\pi}^3 + \sigma^2\boldsymbol{\pi}))$ und $\Sigma_V = -2G_v n$.

In der MFA wird die Quarkdynamik also so reduziert, dass man diese auf die Form eines Teilchens zurückführt, welches sich in einem Potential U bewegt. Auf diese Weise wird die Auswertung der Zustandssumme stark vereinfacht.

Falls sowohl G_{s8} als auch G_v null sind, wird die MFA mittels des Gaußintegrals

$$\frac{1}{N'} \exp \left\{ i \int d^4x \frac{A^2}{4B} \right\} = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ i \int d^4x (\pm A\phi - B\phi^2) \right\} \quad (3.17)$$

sogar exakt, wenn man A mit $\bar{\psi}\psi$ sowie B mit $(4G_s)^{-1}$ identifiziert. Das hierbei eingeführte Feld ϕ nennt man Hilfsfeld, es kann mit $2G_s\sigma$ identifiziert werden (N' ist die Normierung). Entsprechend kann mit den Pionen verfahren werden.

$\mathbf{N}_f = 3$ Hier gibt es entsprechend die Kondensate σ_i, \mathbf{K}_i und n_i , mit $i = u, d, s$.

Aufgrund der flavourmischenden Wechselwirkung sieht man eine bedeutend kompliziertere Struktur als in $\mathbf{N}_f = 2$:

$$\begin{aligned} \Sigma_{s,i} &= -2G_{4q}(\sigma_i + i\gamma_5\mathbf{K}_i) - 2G_{6q}(\sigma_j\sigma_k + i\gamma_5\mathbf{K}_j\mathbf{K}_k) \\ \Sigma_{V,i} &= -2G_v n_i \\ U &= G_s(\sigma_i^2 + \mathbf{K}_i^2) + 4G_{6q}(\sigma_u\sigma_d\sigma_s + i\gamma_5\mathbf{K}_u\mathbf{K}_d\mathbf{K}_s) - G_v n_i^2 . \end{aligned}$$

Die Indizes j und k in $\Sigma_{s,i}$ zeigen die jeweils anderen beiden Flavours an. Schließlich ergibt sich

$$\mathcal{L}_{\text{MFA}}^{N_f=3} = \bar{\psi}(i\not{D} - \gamma_0 \Sigma_V - M)\psi - U. \quad (3.18)$$

In der Massenmatrix M stehen die jeweiligen Konstituentenmassen $M_i = m_i + \Sigma_{s,i}$ auf den Diagonalelementen. Prinzipiell hat man also dieselbe Struktur wie in $N_f = 2$, allerdings hängen die Konstituentenmassen auch von den Kondensaten anderer Flavours ab.

3.3 Parameterbestimmung

Nachdem man die MFA durchgeführt hat, muss sichergestellt werden, dass die Massen mit denen der ursprünglichen Theorie übereinstimmen. Dies führt auf eine Selbstkonsistenzgleichung (oder, in Analogie zur BCS-Theorie der Supraleitung, zu einer „Gap-Equation“) für die Konstituentenmasse. Die Parameter werden so gewählt, dass experimentelle Größen wie Massen von Teilchen und deren Zerfallsbreiten reproduziert werden. Das Modell ist nicht renormierbar [38] und es wird im Folgenden ein Cut-Off Λ zur Regularisierung der Impulsintegration eingeführt.

$N_f = 2$ Sei im Weiteren $N_f = 2$ und $\mathcal{L}_{WW} = (3.5)$. Das NJL-Modell hängt dann von den Parametern Λ, G_s und der Quarkmasse m_0 ab.

Die Selbstkonsistenzgleichung ergibt sich zu

$$M = m_0 + 4G_s N_c N_f \int_0^\Lambda \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{E(\mathbf{p})}, \quad (3.19)$$

welches wiederum über

$$\langle \bar{\psi}_i \psi_i \rangle = -6M \int_0^\Lambda \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{E(\mathbf{p})} \quad (3.20)$$

mit der Konstituentenmasse zusammenhängt [38]. Die Energiedichte ergibt sich als $E(\mathbf{p}) = \sqrt{\mathbf{p}^2 + M^2}$.

Als zu reproduzierende experimentelle Daten wählt man Masse und Zerfallsbreite des Pions. Aus der Übergangsamplitude vom Vakuum in einen Pionzustand und aus der Selbstenergie des Pions ergeben sich die Bestimmungsgleichungen zu (aus [38])

$$f_\pi^2 = N_c M \int_0^\Lambda \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{E^3(\mathbf{p})} \quad (\pi\text{-Zerfallsbreite}), \quad (3.21)$$

$$m_\pi^2 = -\frac{m_0}{M} (4iG_s N_c N_f I(m_\pi^2))^{-1} \quad (\pi\text{-Masse}) \quad (3.22)$$

$$\text{mit} \quad I(k) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \left\{ \left[\left(p + \frac{k}{2} \right)^2 - M^2 \right] \left[\left(p - \frac{k}{2} \right)^2 - M^2 \right] \right\}^{-1}. \quad (3.23)$$

Im chiralen Grenzfall findet man $m_\pi = 0$ und kann die drei Pionen mit den masselosen Nambu-Goldstone-Bosonen identifizieren, die durch die spontane Symmetriebrechung entstehen.

Berechnung von (3.22) Um auch in m_π^2 das 3D-Cut-Off-Schema einzuführen muss (3.23) zunächst über p_0 integriert werden.

$$iI(m_\pi^2) = i \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \left\{ \left[\left(p + \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - M^2 \right] \left[\left(p - \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - M^2 \right] \right\}^{-1}$$

Sei $m_\pi^2 = (m_\pi^2, 0, 0, 0)$. Daraus folgt

$$\left(p \pm \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - M^2 = -\mathbf{p}^2 + \left(p_0 \pm \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - M^2 = \left(-ip_0 \pm \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - E^2(\mathbf{p}).$$

Dann ist

$$\begin{aligned} iI(m_\pi^2) &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{idp_0}{2\pi} \cdot \left\{ \left[\left(-ip_0 + \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - E^2(\mathbf{p}) \right] \left[\left(-ip_0 - \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - E^2(\mathbf{p}) \right] \right\}^{-1} \\ &\quad x \equiv ip_0 \rightarrow dx = idp_0 \\ &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{dx}{2\pi} \cdot \left\{ \left[\left(-ix + \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - E^2(\mathbf{p}) \right] \left[\left(-ix - \frac{m_\pi^2}{2} \right)^2 - E^2(\mathbf{p}) \right] \right\}^{-1} \\ &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{8\pi} \left[-\frac{\arctan\left(\frac{x}{E+m_\pi/2}\right)}{(E+m_\pi/2)m_\pi/2E} + \frac{\arctan\left(\frac{x}{E-m_\pi/2}\right)}{(E-m_\pi/2)m_\pi/2E} \right]_{-\infty}^{\infty} \\ &\stackrel{(A.8)}{=} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{8} \left[-\frac{1}{(E+m_\pi/2)m_\pi/2E} + \frac{1}{(E-m_\pi/2)m_\pi/2E} \right] \\ &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{4E} (E^2 - m_\pi^2/4)^{-1}. \end{aligned}$$

Mit (3.22) erhält man also

$$m_\pi^2 = -\frac{m_0}{M} \left(4G_s N_c N_f \int_0^\Lambda \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{4E} (E^2 - m_\pi^2/4)^{-1} \right)^{-1}. \quad (3.24)$$

Das verbleibende Integral kann analytisch gelöst werden ($b^2 \equiv m_\pi^2/4$, $d^2 \equiv b^2 - M^2$).

$$\begin{aligned} 2\pi^2 \int_0^\Lambda \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{4E} (E^2 - b^2)^{-1} &= \int_0^\Lambda dp p^2 \left(\sqrt{\mathbf{p}^2 + M^2}^3 - b^2 \sqrt{\mathbf{p}^2 + M^2} \right)^{-1} \\ &= \ln(x + E) - \frac{1}{2} \underbrace{\frac{b^2 - M^2}{bd}}_{d/b} \ln \left(2 \frac{M^2 + dx + bE}{x - d} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{b^2 - M^2}{bd} \ln \left(2 \frac{M^2 - dx + bE}{x + d} \right) \Bigg|_0^\Lambda \\ &= \ln(x + E) + \ln \left(\frac{(M^2 + bE - dx)(x - d)}{(M^2 + bE + dx)(x + d)} \right) \Bigg|_0^\Lambda \end{aligned}$$

Für die Pionmasse gilt $m_\pi < 0.2 \text{ GeV} \Rightarrow b^2 < 0,01 \text{ GeV}^2$, während $m^* < 0.3 \text{ GeV}$, was $M^2 < 0,09 \text{ GeV}^2$ entspricht. Daraus folgt $d^2 < 0$, also $d \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Mit $e \equiv id$ lässt sich das Argument des Logarithmus wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} \frac{(M^2 + bE - dx)(x - d)}{(M^2 + bE + dx)(x + d)} &= \frac{b^2x + bEx - ie(x^2 + bE + M^2)}{b^2x + bEx + ie(x^2 + bE + M^2)} \equiv \frac{z^*}{z} \\ &= \frac{(b^2x + bEx)^2 - e^2(x^2 + bE + M^2)^2}{(b^2x + bEx)^2 + e^2(x^2 + bE + M^2)^2} + i \frac{-2(b^2x + bEx)e(x^2 + bE + M^2)}{(b^2x + bEx)^2 + e^2(x^2 + bE + M^2)^2} \end{aligned}$$

Der Betrag des Quotienten einer komplexen Zahl mit ihrem komplex Konjugiertem $|\frac{z^*}{z}|$ ist Eins. Man kann daher $\frac{z^*}{z} = e^{i\varphi}$ schreiben. Des Weiteren ist $\text{Im}(\frac{z^*}{z}) < 0$, daher gilt für die Phase

$$\begin{aligned} \varphi &= -\arccos\left(\frac{(b^2x + bEx)^2 - e^2(x^2 + bE + M^2)^2}{(b^2x + bEx)^2 + e^2(x^2 + bE + M^2)^2}\right) \\ &= -\arccos\left(1 - 2\frac{e^2E^2}{M^2(E^2 - b^2)}\right). \end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \ln(x + E) + \ln\left(\frac{(M^2 + bE - dx)(x - d)}{(M^2 + bE + dx)(x + d)}\right) &\Bigg|_0^\Lambda \\ &= \ln(x + E) + \frac{M^2 - \frac{m_\pi^2}{4}}{m_\pi} \arccos\left(1 - 2\frac{(M^2 - \frac{m_\pi^2}{4})E^2}{M^2(E^2 - \frac{m_\pi^2}{4})}\right) \Bigg|_0^\Lambda \\ &= \ln(\Lambda + E(\Lambda)) + \frac{M^2 - \frac{m_\pi^2}{4}}{m_\pi} \arccos\left(1 - 2\frac{(M^2 - \frac{m_\pi^2}{4})E(\Lambda)^2}{M^2(E(\Lambda)^2 - \frac{m_\pi^2}{4})}\right) \\ &\quad - \ln(M) - \frac{M^2 - \frac{m_\pi^2}{4}}{m_\pi} \pi. \end{aligned}$$

Schließlich ergibt sich die Pionmasse zu

$$\begin{aligned} m_\pi^2 &= -\frac{m_0}{M} (4iG_s N_c N_f)^{-1} \cdot \\ &\quad \cdot \left(\ln\left(\frac{\Lambda + E(\Lambda)}{M}\right) + \frac{M^2 - \frac{m_\pi^2}{4}}{m_\pi} \arccos\left(1 - 2\frac{(M^2 - \frac{m_\pi^2}{4})E(\Lambda)^2}{M^2(E(\Lambda)^2 - \frac{m_\pi^2}{4})}\right) - \frac{M^2 - \frac{m_\pi^2}{4}}{m_\pi} \pi \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Es gilt weiterhin

$$\int_0^\Lambda \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{E^3(\mathbf{p})} = -\frac{1}{2\pi} \left[\frac{\Lambda}{E(\Lambda)} - \ln \left[\frac{\Lambda}{M} + \sqrt{1 + \frac{\Lambda^2}{M^2}} \right] \right]. \quad (3.26)$$

Die Stromquarkmasse m_0 wird beim Lösen des sich so ergebenden Gleichungssystems stets als Konstante angesehen. Das Lösen ergibt für die angegebenen experimentellen Daten bei $m_0 = 5.5 \text{ MeV}$ folgende Parameter:

| | |
|-------------------------|---------------------|
| G_s | Λ |
| 5.498 GeV^{-2} | 0.6315 GeV |
| f_π | m_π |
| 93.3 MeV | 138 MeV |

Werden nun weitere Wechselwirkungen hinzugenommen, verändern sich obige Gleichungen entsprechend. Man erhält pro Wechselwirkung eine weitere Gleichung und muss daher jeweils eine weitere zu reproduzierende Größe hinzunehmen.

$\mathbf{N}_f = \mathbf{3}$ Im Dreiflavourfall ist das GLS grundsätzlich größer, da man zusätzlich die Masse des Strangequarks m_s als Parameter erhält und selbst im einfachsten Fall die 6-Quark-Kopplungskonstante G_{s6} zu bestimmen hat. Hierbei sollen zusätzlich die Kaon- und Etamassen $m_K = 495.7$ MeV und $m_{\eta'} = 957.5$ MeV reproduzieren werden.

3.4 Effektive Theorie für den Polyakovloop

Im Limes unendlicher schwerer Quarkmassen wird die QCD durch die reine Eichtheorie \mathcal{S}_{YM} beschrieben. Der Polyakovloop Φ dient als Ordnungsparameter für den Deconfinementübergang, in welchem die $\mathbb{Z}(N_c)$ -Symmetrie spontan gebrochen wird.

Im Folgenden wird $N = N_c = 3$ und ein statisches Eichfeld betrachtet, wodurch sich

$$\Phi = N_c^{-1} \text{Tr} \exp \{i\beta A_4\} \quad (3.27)$$

ergibt. In der Polyakov-Eichung [6] ist die Wilson-Linie

$$L = e^{i\beta(\phi_3\lambda_3 + \phi_8\lambda_8)} = \text{diag} \left(e^{i\beta\phi_a}, e^{i\beta\phi_b}, e^{i\beta\phi_c} \right) \quad (3.28)$$

diagonal mit $\phi_a = \phi_3 + \frac{\phi_8}{\sqrt{3}}$, $\phi_b = -\phi_3 + \frac{\phi_8}{\sqrt{3}}$ und $\phi_c = -\phi_a - \phi_b = -\frac{2\phi_8}{\sqrt{3}}$ und schließlich

$$\Phi = N_c^{-1} \left(e^{i\beta\phi_a} + e^{i\beta\phi_b} + e^{i\beta\phi_c} \right). \quad (3.29)$$

Für $N_c = 3$ ist Φ eine komplexe Zahl, analog zur ED trägt es also eine Ladung. Ladungskonjugation bewirkt ${}^C A_\mu = A_\mu^*$ und damit ${}^C \Phi = -\Phi_H$ [40]. Eine effektive Theorie muss also sowohl die $\mathbb{Z}(N_c)$ -Symmetrie besitzen als auch unter Ladungskonjugation invariant sein.

Die einfachste Wahl ist

$$\mathcal{L}_{\text{Pol}}^{\text{eff}} = \frac{1}{2} \partial_i \Phi \partial^i \Phi_H + \mathcal{U}(\Phi, \Phi_H, T). \quad (3.30)$$

Der Index H beim Polyakovloop deutet die hermitesch konjugierte Matrix an. In einer MFA wird Φ mit seinem Erwartungswert identifiziert und das Verhalten dieser Theorie hängt allein vom Potential \mathcal{U} ab.

Man weiß, dass der Deconfinementübergang erster Ordnung ist. Für \mathcal{U} gibt es in der Literatur (siehe [6], [8]) zwei unterschiedliche Ansätze:

$$\mathcal{U}_1 = T^4 \left[\frac{-a(T)}{2} \Phi_H \Phi + b(T) \ln [1 - 6\Phi_H \Phi + 4(\Phi^3 + \Phi_H^3) - 3(\Phi_H \Phi)^2] \right] \quad (3.31)$$

$$\mathcal{U}_2 = T^4 \left[-\frac{c(T)}{2} \Phi_H \Phi - \frac{d(T)}{6} (\Phi^3 + \Phi_H^3) + \frac{e(T)}{4} (\Phi_H \Phi)^2 \right]. \quad (3.32)$$

Ansatz \mathcal{U}_1 ist durch eine Starkkopplungsentwicklung motiviert [6], während das Polynom aus \mathcal{U}_2 genau das generische Beispiel für solch einen Übergang ist. Man sieht, dass

| | | | | | |
|------|--|------|------|------|------|
| a(T) | 3.51 - 2.47(ϖ) + 15.22(ϖ) ² | | | | |
| c(T) | 6.75 - 1.95(ϖ) + 2.625(ϖ) ² - 7.44(ϖ) ³ | | | | |
| b(T) | -1.75 (ϖ) ³ | d(T) | 0.75 | e(T) | -7.5 |

 Tabelle 3.2: Vorfaktoren für \mathcal{U}_1 und \mathcal{U}_2 mit $\varpi = T_0/T$ aus [8] und [9].

beide Potentiale sowohl bei Ladungskonjugation als auch unter $\mathbb{Z}(3)$ -Transformationen invariant sind. Die Vorfaktoren wurden [8] und [9] entnommen und so gewählt, dass sie die Gitterergebnisse für das thermodynamische Verhalten der reinen Eichtheorie reproduzieren. Sie finden sich in Tabelle 3.2.

In beiden Potentialansätzen findet sich keine Abhängigkeit von einem möglichen chemischen Potential μ . [40] folgend kann dieses jedoch berücksichtigt werden, zur effektiven Wirkung kommen dann die Terme

$$\Phi \exp \{-\beta(m - \mu)\} + \Phi_H \exp \{-\beta(m + \mu)\} \quad (3.33)$$

hinzu, wobei m die Masse des Quarks anzeigt. Falls m gegen unendlich strebt und μ endlich bleibt, erhält man wiederum den obigen Fall der reinen Eichtheorie. Ein weiterer Ansatz für das Polyakovlooppotential wäre daher

$$\mathcal{U}_3 = \mathcal{U}_{1,2} + T^4 [h\Phi + h'\Phi_H] , \quad (3.34)$$

mit $h = \exp \{-\beta(m - \mu)\}$ und $h' = \exp \{-\beta(m + \mu)\}$. \mathcal{U}_3 erfüllt im Allgemeinen allerdings nicht die $\mathbb{Z}(N_c)$ -Symmetrie. Dieses war zu erwarten, da sie, sobald man chemisches Potential anschaltet, von dynamischen Quarks explizit gebrochen wird. Nur bei verschwindendem Realteil von μ und im Fall unendlich schwerer Quarks erfüllt der Ansatz auch diese Symmetrie. h und h' entsprechen externen Feldern, welche an den Polyakovloop angekoppelt werden.

4 Das Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio-Modell

Es wurden im letzten Kapitel zwei effektive Theorien aufgestellt, eine für den chiralen und eine für den statischen Quarklimit. Beide beschreiben wichtige Eigenschaften der QCD, chirale Symmetrie und Confinement. Eine Zusammenführung beider Modelle zur Kombination beider Symmetrien wurde 2004 von K. Fukushima vorgeschlagen [6]. Die Lagrangedichte des sogenannten Polyakov-NJL-(PNJL)-Modells ist gegeben durch

$$\mathcal{L}_{\text{PNJL}} = \bar{\psi}(i\mathcal{D} - M)\psi + \mathcal{L}_{WW} - \mathcal{U}. \quad (4.1)$$

Die kovariante Ableitung $D^\nu = \partial^\nu - iA^\nu - i\mu\delta_0^\nu$ koppelt das statische Eichfeld $A^\nu = \delta_0^\nu g A_a^\nu \frac{\lambda_a}{2}$ an die Quarks und das zur Baryonenzahl korrespondierende chemische Potential $\mu = \mu_R + i\mu_I = \mu_R + iT\theta$ wird ganz allgemein als komplex angesetzt. Die Confinementeigenschaften werden über das Polyakovlooppotential $\mathcal{U} = \mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$ bzw. \mathcal{U}_3 eingebaut. Mögliche Wechselwirkungen in \mathcal{L}_{WW} entsprechen denen im NJL-Modell und sind chiral-invariant.

4.1 Berechnung des thermodynamischen Potentials

Um nun das Modell auswerten zu können, wird das thermodynamische Potential Ω berechnet. Formal unterscheiden sich die Rechnungen in zwei und drei Flavours bis auf Berechnungen im Flavourraum nicht. Nachdem man die MFA durchgeführt hat, ergibt sich Z als

$$Z = \int i\mathcal{D} [\psi^\dagger \psi A] \exp S. \quad (4.2)$$

Die Wirkung S wird nun geschrieben als

$$S = \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} \mathcal{L}_{\text{PNJL}} = i\psi^\dagger \Delta^{-1} \psi + \mathcal{S}_0. \quad (4.3)$$

Der inverse Quarkpropagator Δ^{-1} ist eine Matrix im Farb-, Flavour-, Impuls- und Diracraum. In $\mathcal{S}_0 = \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} (-U - \mathcal{U})$ stehen nur von \mathbf{x} und τ unabhängige Größen, so dass gilt

$$\mathcal{S}_0 = -(U + \mathcal{U}) \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} = -(U + \mathcal{U})\beta V. \quad (4.4)$$

Hierbei ist V das betrachtete Volumen $\int d^3\mathbf{x}$.

Für die Auswertung eines Quark-Propagators ist folgende Formel wichtig

$$\int i\mathcal{D} [\psi^\dagger \psi] \exp \left\{ i\psi^\dagger \Delta^{-1} \psi \right\} = \det \Delta^{-1}, \quad (4.5)$$

wobei die Determinante über alle Indizes des Propagators läuft.

Das thermodynamische Potential pro Volumen Ω ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned}
 \Omega &= -T/V \ln \left\{ \int i\mathcal{D} [\psi^\dagger \psi A] \exp S \right\} \\
 &= -T/V \ln \left\{ \int i\mathcal{D} [\psi^\dagger \psi A] \exp(i\psi^\dagger \Delta^{-1} \psi + \mathcal{S}_0) \right\} \\
 &\stackrel{(4.5),(4.4)}{=} -T/V \ln \{ \det \Delta^{-1} \} + U + \mathcal{U} \\
 &= \begin{cases} -2N_f \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [3E(\mathbf{p}) + T \ln[F_\pm]] + U + \mathcal{U} \\ -\sum_i 2 \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [3E_i(\mathbf{p}) + T \ln[F_{\pm,i}]] + U + \mathcal{U} \end{cases}, \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

wobei der obere Fall zwei, der untere drei Flavours entspricht. Hierbei wurde im letzten Schritt bereits das Ergebnis für $\ln \det \Delta^{-1}$ für $N_f = 2$ bzw. $N_f = 3$ eingesetzt. Es gilt:

$$F_\pm = 1 + 3(\Phi_{(H)} + \Phi_{H(0)} e^{-\beta E_\pm}) e^{-\beta E_\pm} + e^{-3\beta E_\pm} \text{ und } E_\pm = E(\mathbf{p}) \pm (\mu - \Sigma_V).$$

Der in Klammern stehende Index bezieht sich auf F_- . Im $N_f = 3$ -Fall sind alle entsprechenden Größen noch vom Quarkflavour abhängig, welcher durch einen Index i angezeigt wird.

Formal entspricht Ω (2.11), also der Einschleifenkorrektur zum klassischen Potential.

4.2 Auswertung des Quarkpropagators

Nun wird $\ln \det \Delta^{-1}$ berechnet. Der inverse Quarkpropagator ist

$$\Delta^{-1} = \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} (-i)\gamma_0(i\gamma_\nu D^\nu - \gamma_0 \Sigma_V - M). \quad (4.7)$$

Mit $\gamma_0^2 = 1$ folgt

$$(-i)\gamma_0(i\gamma_\nu D^\nu - \gamma_0 \Sigma_V - M) = (-i)(i\gamma_0 \gamma_\nu D^\nu - \Sigma_V - \gamma_0 M).$$

Für die kovariante Ableitung ergibt sich

$$\begin{aligned}
 i\gamma_0 \gamma_\nu D^\nu &= i\gamma_0 \gamma_\nu (\partial^\nu - iA^\nu - i\mu \delta_0^\nu) \\
 &= i(\partial_t + \gamma_0 \gamma \nabla - iA^0 - i\mu) \\
 &= -\partial_\tau + i\gamma_0 \gamma \nabla + A^0 + \mu.
 \end{aligned}$$

Nun geht man mittels (2.7) in den (n, \mathbf{p}) -Raum über. Das Ausführen der Ableitungen liefert (setze $\mu^* = A_0 + \tilde{\mu} = A_0 + \mu - \Sigma_V$)

$$\begin{aligned}
 \psi^\dagger \Delta^{-1} \psi &= \frac{1}{V} \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} \sum_{n, \mathbf{p}} \sum_{n', \mathbf{p}'} (-i) \exp \left\{ i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \mathbf{x} + (\omega_n - \omega_{n'}) \tau \right\} \cdot \\
 &\quad \cdot (-i\omega_n - \gamma_0 \gamma \mathbf{p} + A^0 + \mu - \Sigma_V - \gamma_0 M) \\
 &\stackrel{(A.9)}{=} \frac{-i}{V} \sum_{n, \mathbf{p}} (-i\omega_n - \gamma_0 \gamma \mathbf{p} + \mu^* - \gamma_0 M) \underbrace{\int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x}}_{\beta V} \\
 &= -i\beta \sum_{n, \mathbf{p}} (-i\omega_n - \gamma_0 \gamma \mathbf{p} + \mu^* - \gamma_0 M). \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

Nun lassen sich die verschiedenen Determinanten berechnen.

Determinante im Dirac-Raum Einsetzen der γ -Matrizen ergibt

$$\Delta^{-1} = \beta \begin{pmatrix} -\omega_n - i\mu^* + iM & -\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} \\ -\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} & -\omega_n - i\mu^* - iM \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

wobei es sich bei den Einträgen von Δ^{-1} jeweils um 2×2 -Matrizen handelt. Man kann daher die hilfreiche Formel

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \Rightarrow \det M = \det C \det (A - BC^{-1}B) \quad (4.10)$$

anwenden und erhält

$$\det_D \Delta^{-1} = \beta^4 \left[(\omega_n + i\mu^*)^2 + \underbrace{\mathbf{p}^2 + M^2}_{=E^2} \right]^2. \quad (4.11)$$

Determinante im (n, \mathbf{p}) -Raum Die Determinante im Impuls-Raum entspricht wegen $\ln \det A = \text{Tr} \ln A$ den beiden Summen über n und \mathbf{p} . Betrachte zunächst die Summe über n . Mit (4.11) ist folgender Ausdruck auszuwerten

$$\begin{aligned} \ln \det_n \Delta^{-1} &= 2 \sum_{n, \mathbf{p}} \ln (\beta^2 (\omega_n + i\mu^*)^2 + \beta^2 E^2) \\ &= \sum_{n, \mathbf{p}} \left\{ \ln \left[\beta^2 (\omega_n^2 + (E - \mu^*)^2) \right] + \ln \left[\beta^2 (\omega_n^2 + (E + \mu^*)^2) \right] \right\} \\ &= \sum_{n, \mathbf{p}} \left\{ \ln \left[(2n + 1)^2 \pi^2 + \beta^2 (E \pm \mu^*)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Nun benutzt man folgenden Zusammenhang, um die Summe auf eine bekannte Form zurückzuführen:

$$\ln [a + b] - \ln [a + 1] = \int_1^b \frac{d\theta^2}{\theta^2 + a}, \quad (4.13)$$

und so erhält man

$$\ln \det_n \Delta^{-1} \stackrel{(4.13)}{=} \sum_{n, \mathbf{p}} \int_1^{\beta^2 (E \pm \mu^*)^2} \frac{d\theta^2}{\theta^2 + (2n + 1)^2 \pi^2} + \sum_{n, \mathbf{p}} 2 \ln \left[1 + (2n + 1)^2 \pi^2 \right]. \quad (4.14)$$

Der hintere Term hängt nicht mehr von β und μ^* ab und ist daher für die Physik irrelevant. Beim ersten Term lassen sich nun Integration und Summation vertauschen. Der Nenner kann in

$$\theta^2 + (2n + 1)^2 \pi^2 = 4\pi^2 \left(n - \underbrace{\left(\frac{-i\theta}{2\pi} - \frac{1}{2} \right)}_{\equiv x} \right) \left(n - \underbrace{\left(\frac{i\theta}{2\pi} - \frac{1}{2} \right)}_{\equiv x^*} \right) \quad (4.15)$$

zerlegt werden und man kann die Summe somit durch

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(n-a)(n-b)} = \frac{\pi(\cot \pi a - \cot \pi b)}{b-a} \quad (4.16)$$

ausführen. x und x^* sind komplex, daher braucht man noch

$$\cot(a+ib) = \frac{-\sin(2a)}{\cos 2a - \cosh 2b} + i \frac{\sinh 2b}{\cos 2a - \cosh 2b}, \quad (4.17)$$

um das Ergebnis zu vereinfachen. Für die Summe über n ergibt sich insgesamt

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(n-x)(n-x^*)} &\stackrel{(4.16)}{=} \frac{1}{4\pi^2} \frac{\pi(\cot \pi x - \cot \pi x^*)}{x^* - x} \\ &= \frac{\pi^2}{4\pi^2 i \theta} [\cot(-\pi/2 - i\theta/2) - \cot(-\pi/2 + i\theta/2)] \\ &\stackrel{(4.17)}{=} \frac{1}{4i\theta} \left[\frac{-\sin(\pi) + \sin(\pi)}{\cos \pi - \cosh \theta} - i \frac{2 \sinh \theta}{\cos \pi - \cosh \theta} \right] \\ &= \frac{1}{2\theta} \left[\frac{\sinh \theta}{1 + \cosh \theta} \right] = \frac{1}{2\theta} \left[\frac{2 \sinh \frac{\theta}{2} \cosh \frac{\theta}{2}}{2 \cosh^2 \frac{\theta}{2}} \right] \\ &= \frac{1}{2\theta} \left[\tanh \frac{\theta}{2} \right] = \frac{1}{\theta} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{e^\theta + 1} \right]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Nun kann man über θ integrieren:

$$\begin{aligned} \int_1^{\beta^2(E \pm \mu^*)^2} d\theta^2 \frac{1}{\theta} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{e^\theta + 1} \right] &\stackrel{y=\sqrt{\theta^2}}{=} 2 \int_1^{\beta(E \pm \mu^*)} dy \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{e^y + 1} \right] \\ &= \int_1^{\beta(E \pm \mu^*)} dy \left[1 - \frac{e^{-y}}{e^{-y} + 1} \right] \\ &= y + 2 \ln \{1 + e^{-y}\} \Big|_1^{\beta(E \pm \mu^*)} \end{aligned}$$

und es folgt

$$\begin{aligned} \Rightarrow \ln \det_n \Delta^{-1} &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \beta E + \ln [\exp(-\beta(E + \mu^*)) + 1] \\ &\quad + \ln [\exp(-\beta(E - \mu^*)) + 1]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Da ein unendliches Volumen betrachtet wird, liegen die Impulse quasikontinuierlich, wodurch die Impulssummation wieder als Integral geschrieben werden kann:

$$\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} V.$$

Determinante im Farbraum Der erste Term in (4.19) ist unabhängig von Farbindizes und liefert einen Faktor N_c . In den beiden Logarithmen kommt mit A_0 eine Matrix im

Farbraum vor. Diese kann auf den Polyakovloop zurückgeführt werden ($A_4 = iA_0$):

$$\begin{aligned}
 \ln \det_c \left(1 + e^{-\beta(E \pm \tilde{\mu})} e^{\mp i A_0} \right) &= \ln \det_c \left(1 + e^{-\beta(E \pm \tilde{\mu})} e^{\mp i A_4} \right) \\
 &= \ln \det_c \left(\mathbb{1}_c + e^{-\beta(E \pm \tilde{\mu})} L_{(H)} \right) \\
 &\stackrel{(3.28)}{=} \ln \prod_{i=a,b,c} \left(1 + e^{-\beta(E \pm \tilde{\mu})} e^{\mp i \beta \phi_i} \right) \\
 &= \ln \left[1 + e^{-3\beta E_{\pm}} + N_c e^{-2\beta E_{\pm}} \Phi_{(H)} + N_c e^{-\beta E_{\pm}} \Phi_{H(\cdot)} \right] \\
 &= \ln [F_{\pm}] \tag{4.20}
 \end{aligned}$$

Der in Klammern stehende Index bezieht sich auf F_{-} . Bei $N_f = 3$ erhält die Energie E und in dieser die Masse noch einen Flavourindex i .

Anmerkung: Für den Fall $A_0 = 0$ hängt keine Größe mehr von Farbindices ab, sodass man

$$\ln \det_c \left(1 + e^{-\beta(E \pm \tilde{\mu})} \right) = N_c \ln \left[1 + e^{-\beta E_{\pm}} \right] \tag{4.21}$$

erhält.

Determinante im Flavour-Raum Abschließend ist noch die Determinante im Flavourraum zu berechnen. Die einzigen flavourbehafteten Größen sind die Massen der Quarks.

$N_f = 2$ Da die beiden Quarks massenentartet sind, hängt kein Eintrag von Δ^{-1} von Flavourindices ab. Δ^{-1} ist also eine Diagonalmatrix im Flavourraum und der Logarithmus der Determinante liefert einen Faktor N_f :

$$\ln \det \Delta^{-1} = -2V N_f \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} [3\beta E(\mathbf{p}) + \ln[F_+] + \ln[F_-]] . \tag{4.22}$$

$N_f = 3$ Die Massen sind hier stark unterschiedlich. Die Spur lässt sich nun nicht wie oben zu N_f zusammenfassen, sondern man erhält eine Summe über die einzelnen Flavourbeiträge ($i = u, d, s$):

$$\ln \det \Delta^{-1} = - \sum_i 2V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} [3\beta E_i(\mathbf{p}) + \ln[F_{+,i}] + \ln[F_{-,i}]] . \tag{4.23}$$

Im hier betrachteten Grenzfall $m_u = m_d = m_0$ sind die Kondensate beider Flavours nicht unterscheidbar. Von daher gilt auch $M_u = M_d = M$ und $E_u = E_d = E$ und es folgt

$$\begin{aligned}
 \ln \det \Delta^{-1} &= -4V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} [3\beta E(\mathbf{p}) + \ln[F_+] + \ln[F_-]] \\
 &\quad - 2V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} [3\beta E_s(\mathbf{p}) + \ln[F_{+,s}] + \ln[F_{-,s}]] . \tag{4.24}
 \end{aligned}$$

4.3 Eigenschaften des thermodynamischen Potentials

Das thermodynamische Potential Ω kann nun dahingehend untersucht werden, ob es auch QCD-Eigenschaften besitzt. Als einen ersten Test kann man ein rein imaginäres chemisches Potential $\mu = iT\theta$ ansetzen und die erweiterten $\mathbb{Z}(N_c)$ -Transformationen (2.14) anwenden, unter denen die QCD invariant ist. Der Polyakov-Loop transformiert gemäß $\Phi \rightarrow \Phi e^{-\frac{2\pi ik}{N_c}}$, ist also nicht invariant. Trotzdem gilt wegen

$$\begin{aligned} \Phi_H \Phi &\rightarrow \Phi_H \Phi & \text{und} & & \Phi^3 &\rightarrow \Phi^3 e^{-\frac{3*2\pi ik}{3}} = \Phi^3 e^{-2\pi ik} = \Phi^3 \\ & & \text{sowie} & & \Phi e^{i\theta} &\rightarrow \Phi e^{-\frac{2\pi ik}{3}} e^{i\theta} e^{\frac{2\pi ik}{3}} = \Phi e^{i\theta}, \end{aligned}$$

dass das Polyakov-Potential \mathcal{U} stets invariant ist. Weiter gilt

$$E_{\pm} = E(\mathbf{p}) \pm iT\theta \quad (4.25)$$

und damit

$$\begin{aligned} F_{\pm} &= \left[1 + e^{-3\beta E(\mathbf{p})} e^{-3i\theta} + 3e^{-2\beta E(\mathbf{p})} e^{-2i\theta} \Phi_{H(\cdot)} + 3e^{-\beta E(\mathbf{p})} e^{-i\theta} \Phi_{(H)} \right] \\ &\rightarrow \left[1 + e^{-3\beta E(\mathbf{p})} e^{-3i\theta} e^{-\frac{3*2\pi ik}{3}} + 3e^{-2\beta E(\mathbf{p})} e^{-2i\theta} \Phi_{H(\cdot)} e^{-\frac{2*2\pi ik}{3}} e^{\pm \frac{2\pi ik}{3}} \right. \\ &\quad \left. + 3e^{-\beta E(\mathbf{p})} e^{-i\theta} \Phi_{(H)} e^{-\frac{2\pi ik}{3}} e^{\pm \frac{2\pi ik}{3}} \right] = F_{\pm} \end{aligned}$$

In [22] wurde gezeigt, dass die Kondensate die Periodizität $\sigma(\theta + \frac{2\pi k}{N_c}) = \sigma(\theta)$ erfüllen. Somit ist Ω unter (2.14) invariant und besitzt wie erwartet die RW-Symmetrie. Ein Makel hierbei ist, dass Φ nicht invariant unter dieser Transformation ist. Daher definiert man den modifizierten Polyakov-Loop Ψ gemäß

$$\Psi = \Phi e^{i\theta} \quad (4.26)$$

als invariante Größe.

Als physikalische Observable muss Ω reell sein, also Ω^* entsprechen. Hierdurch kann man bereits Aussagen über die vorkommenden Größen treffen.

In U stehen nur quadratische Kombinationen der Systemvariablen, somit ist U reell, falls diese entweder alle rein reell oder alle rein imaginär sind. Damit die Energiedichte reell ist, muss das Quadrat $M^{*2} = m_0^2 + \Sigma_s^{*2} - 2m_0 \Sigma_s^*$ der konjugierten Konstituentenmasse reell sein. Somit muss Σ_s reell sein, wodurch wiederum folgt, dass σ reell ist und π rein imaginär.

F_{\pm} ist im Allgemeinen komplex. Jedoch muss $\ln[F_-] + \ln[F_+] = \ln[F_+ F_-]$ reell sein. Da man über Σ_V noch keine Aussage treffen kann, schreibt man vorerst $\mu = \mu_R + i\mu_I$ und erhält dann

$$\begin{aligned} F_+ F_- &= 1 + e^{-6\beta E} + N_c^2 (e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E}) \Phi_H \Phi \\ &\quad + N_c^2 e^{-3\beta E} \left(\Phi^2 e^{-2\beta(\mu_R + i\mu_I)} + \Phi_H^2 e^{2\beta(\mu_R + i\mu_I)} \right) \\ &\quad + N_c \left(e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E} \right) \left(\Phi e^{-2\beta(\mu_R + i\mu_I)} + \Phi_H e^{2\beta(\mu_R + i\mu_I)} \right) \\ &\quad + N_c \left(e^{-\beta E} + e^{-5\beta E} \right) \left(\Phi e^{\beta(\mu_R + i\mu_I)} + \Phi_H e^{-\beta(\mu_R + i\mu_I)} \right) \\ &\quad + e^{-3\beta E} \left(e^{3\beta(\mu_R + i\mu_I)} + e^{-3\beta(\mu_R + i\mu_I)} \right). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Der letzte Term ist proportional zu $\cosh z$ mit komplexem Argument z , welcher im Allgemeinen komplex ist. Von daher muss entweder μ_R oder μ_I verschwinden. Im ersten Fall erhält man Terme der Form $(\Phi e^{\beta\mu_I} + \Phi_H e^{-\beta\mu_I})$, die nur durch die Wahl $\Phi_H = \Phi^*$ reell werden. Im zweiten Fall kann nur durch reelles Φ und Φ_H der gesamte Ausdruck reell werden. Durch diese Wahlen sind auch \mathcal{U}_1 und \mathcal{U}_2 reell. Für den dritten Ansatz \mathcal{U}_3 gilt dies nur bei rein imaginärem μ . Mit der Quarkzahldichte n ist auch Σ_V reell oder imaginär, daher ist n im ersten Fall rein imaginär und im zweiten rein reell.

Hierdurch wird $F_+ F_- \equiv F$ vereinfacht und man erhält für $\mu_I = 0$:

$$\begin{aligned} F &= 1 + e^{-6\beta E} + N_c^2 (e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E}) \Phi_H \Phi + N_c^2 e^{-3\beta E} (\Phi^2 e^{-2\iota} + \Phi_H^2 e^{2\iota}) \\ &\quad + N_c (e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E}) (\Phi e^{-2\iota} + \Phi_H e^{2\iota}) \\ &\quad + N_c (e^{-\beta E} + e^{-5\beta E}) (\Phi e^\iota + \Phi_H e^{-\iota}) + e^{-3\beta E} (e^{3\iota} + e^{-3\iota}) \end{aligned} \quad (4.28)$$

mit $\iota = \beta(\mu_R - \Sigma_V)$. Φ und Φ_H sind reelle Zahlen, für $\mu \neq 0$ gilt jedoch $\Phi \neq \Phi_H$, was sich mit [4] deckt. Der Polyakov-Loop ist proportional zur Wellenfunktion des Quarks, sein konjugiertes Gegenstück zu der des Antiquarks. Bei nichtverschwindendem reellem μ sind mehr Quarks als Antiquarks im System vorhanden, so dass auch die beiden Erwartungswerte unterschiedlich sein können.

Für $\mu_R = 0$ ist

$$\begin{aligned} F &= 1 + e^{-6\beta E} + N_c^2 (e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E}) \Phi^* \Phi + 2N_c^2 e^{-3\beta E} \operatorname{Re}(\Phi^2 e^{-2i\alpha}) \\ &\quad + 2N_c (e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E}) \operatorname{Re}(\Phi e^{-2i\alpha}) + 2N_c (e^{-\beta E} + e^{-5\beta E}) \operatorname{Re}(\Phi e^{i\alpha}) \\ &\quad + 2e^{-3\beta E} \cos 3\alpha \end{aligned} \quad (4.29)$$

mit $\alpha = \theta - \beta \operatorname{Im} \Sigma_V$. Φ ist eine komplexe Zahl, Φ^* sein komplex Konjugiertes. Man kann die RW-Periodizität ausnutzen, um die Systemvariablen X weiter zu spezifizieren [7]. $\Omega(\theta)$, $|\Phi|$ und σ sind gerade Funktionen von θ , $\operatorname{Arg}(\Phi)$ und n ungerade. Für eine gerade Funktion X mit Periode ω gilt allgemein

$$X(\omega/2 + \epsilon) \stackrel{\text{gerade}}{=} X(-\omega/2 - \epsilon) \stackrel{\text{periodisch}}{=} X(\omega/2 - \epsilon), \quad (4.30)$$

so dass genau bei $\omega/2$ eine Unstetigkeit auftritt, wenn die Steigung dort ungleich Null ist. Hier ist $\omega/2 = \pi/3$, von daher ist an dieser Stelle ein Phasenübergang zu erwarten. Analoge Überlegungen für ungerade Funktionen liefern entsprechend $X(\omega/2 + \epsilon) = -X(\omega/2 - \epsilon)$. Dies bedeutet, dass X bei $\omega/2$ einen Sprung machen muss, falls es nicht verschwindet. Bei $\theta = 0$ müssen alle ungeraden Funktionen verschwinden. Entsprechende Argumente haben auch Roberge und Weiss in ihrer Arbeit benutzt. Man erwartet daher ein Phasendiagramm ähnlich zu Abbildung 1.2 bei Variation von θ .

Bei μ_R und $\mu_I = 0$ müssen beide Ausdrücke ineinander übergehen, was nur durch $n = 0$ und $\Phi_H = \Phi$ geleistet werden kann.

Ein interessanter Grenzfall ergibt sich für $A_4 = 0$. Dann entspricht Ω gerade dem Pendant Ω_{NJL} aus dem ursprünglichen NJL-Modell. Als Systemvariablen bleiben dann die Kondensate übrig und F verändert sich gemäß (4.21).

Insgesamt hat man also die Systemvariablen $X = \{\sigma, \boldsymbol{\pi}, n, \Phi, \Phi^*\}$ mit komplexem Φ bzw. $X = \{\sigma, \boldsymbol{\pi}, n, \Phi, \Phi_H\}$ bei reellem $\Phi_{(H)}$, jeweils in Abhängigkeit von T und μ . Der

physikalische Wert entspricht dem Minimum von Ω , welches über die Extremalbedingung

$$\frac{\partial \Omega}{\partial X} = 0 \quad (4.31)$$

gegeben ist.

Um den Punkt eines Phasenübergangs der Systemgrößen zu finden, muss man noch die jeweilige Suszeptibilität berechnen. Nach [6] ergibt sich die Suszeptibilitätsmatrix χ als

$$\chi = C^{-1}, \quad (4.32)$$

wobei C eine Matrix mit $C_{ij} \sim \partial_{X_i} \partial_{X_j} \Omega$ ist. Auf den Diagonalelementen von χ stehen dann die für den Übergang der jeweiligen Größe relevanten Einträge.

5 Numerische Methoden

Die Extremalbedingung (4.31) für das thermodynamische Potential Ω stellt ein Gleichungssystem (GLS) in $|X|$ Dimensionen dar, und auch bei der Parameterbestimmung im NJL-Modell muss ein GLS gelöst werden. Dieses ist wegen der auftretenden Nichtlinearitäten analytisch nicht möglich. Weiterhin stößt man bei $\int \ln[F_{\pm}] d\mathbf{p}^3$ auf Probleme, da keine analytische Stammfunktion angegeben werden kann.

Von daher ist eine numerische Behandlung unumgänglich. Auf Algorithmen aus [41] aufbauend, wurde ein C++-Programm geschrieben, welches (4.31) löst und außerdem die graphische Auswertung über Gnuplot steuert. Zur Überprüfung der Ergebnisse wurde Mathematica herangezogen.

5.1 Lösen von nichtlinearen Gleichungssystemen

Betrachtet man ein GLS in N Dimensionen, so kann es immer auf die Form

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (5.1)$$

gebracht werden. Für $N > 1$ ist das Auffinden von \mathbf{x} sehr schwierig. Die Idee hinter dem Algorithmus wird jedoch dieselbe sein wie die in einer Dimension. Allgemein lässt sich sagen, dass stets eine grobe Eingrenzung der Lösung vonnöten ist, um diese zu bestimmen. In einer Dimension muss man die Nullstelle

$$f(x) = 0 \quad (5.2)$$

finden. Von dieser sei bekannt, dass sie im Intervall $[a, b]$ liegt. Die Taylorentwicklung von f um einen (beliebigen) Startwert $x_i \in [a, b]$ ist

$$f(x_i + \delta) \approx f(x_i) + f'(x_i)\delta + \frac{f''(x_i)}{2}\delta^2 + \dots \quad (5.3)$$

Für kleine δ kann man nichtlineare Terme vernachlässigen, man verbleibt mit der Tangente an x_i . Die Idee ist nun folgende: Man folgt der Tangente bis zum Schnittpunkt mit der x -Achse und nimmt diesen Wert als neuen Startwert x_{i+1} . Bei $f(x_i + \delta)$ erhält man dann $\delta = -\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$ und somit den neuen Startwert $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$. Geometrisch folgt man also dem Verlauf der Funktion solange zu kleineren $f(x)$ bis man die Nullstelle gefunden hat. Diese sogenannte Newton-Raphson-Methode ist sehr effizient, da sie quadratisch konvergiert [41]. Allerdings ist Vorsicht bei der Wahl des Startwerts geboten, da man ebenso auf ein Minimum der Funktion zulaufen kann. Über den Zwischenwertsatz kann man grundsätzlich aussagen, ob eine Nullstelle in $[a, b]$ liegt.

In höheren Dimensionen wird das Auffinden aufgrund der Nichtlinearitäten ungleich schwerer, da man mehrere Nullstellen simultan finden muss. Die einfachste Methode

hierzu ist eine verallgemeinerte Newton-Raphson-Methode. Die Taylorentwicklung um den Startwert \mathbf{x} ist dann

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}\delta\mathbf{x} + \mathcal{O}(\delta\mathbf{x}^2), \quad (5.4)$$

bzw. für eine Komponente $f_i (i = 0, \dots, N - 1)$ von \mathbf{f}

$$f_i(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = f_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j + \mathcal{O}(\delta\mathbf{x}^2). \quad (5.5)$$

Die Jacobimatrix \mathbf{J} ist definiert als

$$J_{ij} \equiv \frac{\partial f_i}{\partial x_j}. \quad (5.6)$$

Ganz analog zum eindimensionalen Problem sucht man nun die Nullstelle der Tangente auf f in \mathbf{x} und erhält das lineare GLS

$$\mathbf{J}\delta\mathbf{x} = -\mathbf{f}. \quad (5.7)$$

Diese Matrixgleichung kann nun durch LU -Zerlegung nach $\delta\mathbf{x}$ aufgelöst werden und man erhält im nächsten Schritt als neuen Startwert \mathbf{x}'

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{J}^{-1}\mathbf{f}. \quad (5.8)$$

Theoretisch funktioniert dies also genau wie in einer Dimension. Die Abhängigkeit der Konvergenz zu einer echten Nullstelle vom richtigen „Raten“ des Anfangswertes ist jedoch wesentlich höher. Es kann passieren, dass man sich nach einem Schritt $\delta\mathbf{x}$ nicht näher an der Nullstelle befindet als vorher. Zur Verbesserung kann man fordern, dass das Betragsquadrat von $\mathbf{f}(\mathbf{x}')$ zumindestens abnimmt. Hierzu definiert man die Funktion

$$f^* = \frac{1}{2} \mathbf{f} \mathbf{f}, \quad (5.9)$$

deren Gradient

$$\nabla f^* \delta\mathbf{x} = (\mathbf{f} \mathbf{J})(-\mathbf{J}^{-1} \mathbf{f}) = -\mathbf{f} \mathbf{f} < 0 \quad (5.10)$$

negativ ist. Falls nun der ursprüngliche Schritt $\delta\mathbf{x}$ f^* nicht zufriedenstellend verkleinert hat, wird $\delta\mathbf{x}$ mit einem Faktor λ reskaliert ($0 < \lambda \leq 1$). Da der Gradient von f^* stets negativ ist, findet man so einen kleineren Wert von f^* , wodurch der neue Startwert $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \lambda\delta\mathbf{x}$ gefunden wurde. Die Jacobimatrix \mathbf{J} enthält die zweiten Ableitungen von Ω und ist symmetrisch. Somit reicht es aus, nur die Hälfte aller Nichtdiagonalelemente zu berechnen.

5.2 Numerische Integration

Im Folgenden werden nur eindimensionale Integrale betrachtet, da mehrdimensionale Integrationen bei keinem der auftretenden GLS vonnöten ist; die Impulsintegrale hängen stets nur von p^2 ab. Die einfachste Möglichkeit zur numerischen Integration

einer Funktion $f(x)$ über ein Intervall $[a, b]$ besteht darin, $f(x)$ bei a und b auszuwerten und den Mittelwert zu bilden. Durch Hinzunahme weiterer Stützstellen wird die Genauigkeit erhöht. Bei weiter ausgereiften Algorithmen werden die Funktionswerte an den Stützstellen gewichtet, um eine optimale Konvergenz zu erreichen. Bei indefiniten Integralen kann die Endlichkeit der Grenzen durch Variablentransformationen erreicht werden.

Zur Berechnung der Integrale wird die Gaußintegration verwendet. Deren Idee ist nicht nur die geschickte Wahl von Gewichtungsfaktoren w_j , sondern ebenfalls die der Stützstellen x_j . Man erhält

$$\int_a^b W(x)f(x) dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} w_j f(x_j) . \quad (5.11)$$

Die Funktion $W(x)$ dient hierbei zur eleganten Berechnung von w_j . Man verwendet orthogonale Polynome zur Darstellung von $f(x)$ auf $[a, b]$ und kann zeigen, dass die Stützstellen gerade den Nullstellen dieser Polynome entsprechen [41]. N gibt die Ordnung an, bis zu der die Polynome berechnet wurden. Auf diese Weise wird die Integration auf die N -fache Auswertung der Funktion, N Multiplikationen und N Summationen heruntergebrochen. Natürlich hängt das Ergebnis nun stark von N ab, weswegen man die Konvergenzeigenschaften stets überprüfen muss.

Es treten im Weiteren zwei Arten von Integralen auf, welche mit den angegebenen Polynomen parametrisiert werden:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx & \quad \text{Legendrepolynome} \\ \int_0^\infty x^v e^{-x} f(x) dx & \quad \text{Laguerrepolynome} \end{aligned} \quad (5.12)$$

5.3 Setup der Simulationen

Die in (4.31) auftretenden Integrale müssen noch auf die Form von (5.12) gebracht werden. Das Einführen von Kugelkoordinaten ergibt

$$\int \frac{1}{(2\pi)^3} d\mathbf{p}^3 \rightarrow \int_0^\infty \frac{p^2}{2\pi^2} dp . \quad (5.13)$$

In den mit den Laguerrepolynomen gelösten Integralen ist also $v = 2$ und zum Integranden muss der Term e^{+p} multipliziert werden.

Das Integral $\int_0^\infty \frac{p^2}{2\pi^2} E(p) dp$ divergiert. Zur Regularisierung wird ein Cut-Off Λ eingefügt. Dieser entspricht der im NJL-Modell eingeführten Größe. Eine grundsätzliche Frage ist nun, ob auch der (nichtdivergente) Term $\int_0^\infty \frac{p^2}{2\pi^2} \ln[F] dp$ auf diese Weise regularisiert wird oder nicht. [8] folgend wird dies nicht getan, um den korrekten Stefan-Boltzmann-Limes zu erhalten; auf die Unterschiede zwischen beiden Methoden wird weiter unten eingegangen.

Vernachlässige im Folgenden Mesonkondensate ($\boldsymbol{\pi}, \mathbf{K} = 0$) sowie die Quarkzahldichte n und betrachte ein rein imaginäres μ . Der Polyakovloop tritt dann als komplexe Zahl auf. Es ist geschickt, diese als $\Phi = Re^{i\varphi}$ zu parametrisieren, da man so direkt den

Betrag und die Phase als dynamische Variablen erhält. Diese Parametrisierung führt auf dasselbe Ergebnis, da

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega}{\partial \Phi} = 0 \wedge \frac{\partial \Omega}{\partial \Phi^*} = 0 &\Leftrightarrow \operatorname{Re} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \Phi} \right) = 0 \wedge \operatorname{Im} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \Phi} \right) = 0 \\ &\Leftrightarrow \frac{\partial \Omega}{\partial R} = 0 \wedge \frac{\partial \Omega}{\partial \varphi} = 0. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Schreibe ab jetzt die Ableitung $\frac{\partial}{\partial X}$ als ∂_X . Mit dem Umschreiben von Φ ergibt sich (4.29) dann zu

$$\begin{aligned} F &= 1 + e^{-6\beta E} + 3^2 R^2 \left(e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E} + 2e^{-3\beta E} \cos(2\varphi - \alpha) \right) \\ &\quad + 2 \cdot 3R \left(\left(e^{-2\beta E} + e^{-4\beta E} \right) \cos(\varphi - 2\alpha) + \left(e^{-\beta E} + e^{-5\beta E} \right) \cos(\varphi + \alpha) \right) \\ &\quad + 2e^{-3\beta E} \cos 3\alpha \end{aligned} \quad (5.15)$$

und

$$\mathcal{U}_1 = T^4 \left[\frac{-a(T)}{2} R^2 + b(T) \ln [1 - 6R^2 + 8R^3 \cos(3\varphi) - 3R^4] \right] \quad (5.16)$$

$$\mathcal{U}_2 = T^4 \left[-\frac{c(T)}{2} R^2 - \frac{d(T)}{3} R^3 \cos(3\varphi) + \frac{e(T)}{4} R^4 \right] \quad (5.17)$$

$$\mathcal{U}_3 = \mathcal{U}_{1,2} + \sum_i T^4 \exp \{ -\beta m_i \} 2R \cos(\phi + \theta). \quad (5.18)$$

Hierbei ist m_i die Stromquarkmasse des jeweiligen Quarkflavour.

Nun kann (4.31) in beiden Fällen aufgestellt werden:

$N_f = 2$

$$\partial_R \Omega = -TN_f I_{11} + \partial_R \mathcal{U} = 0 \quad (5.19a)$$

$$\partial_\varphi \Omega = -TN_f I_{12} + \partial_\varphi \mathcal{U} = 0 \quad (5.19b)$$

$$\partial_\sigma \Omega = -TN_f I_{13} - N_f I_{14} + \partial_\sigma U = 0 \quad (5.19c)$$

$N_f = 3$

$$\partial_R \Omega = -T2I_{11} - TK_{11} + \partial_R \mathcal{U} = 0 \quad (5.20a)$$

$$\partial_\varphi \Omega = -T2I_{12} - TK_{12} + \partial_\varphi \mathcal{U} = 0 \quad (5.20b)$$

$$\partial_\sigma \Omega = -2I_{13} - 2I_{14} - TK_{13} - K_{14} + \partial_\sigma U = 0 \quad (5.20c)$$

$$\partial_{\sigma_s} \Omega = -2K_{15} - 2TK_{16} - K_{17} - TK_{18} + \partial_{\sigma_s} U = 0 \quad (5.20d)$$

In (A.3) sind alle auftretenden Integrale zusammengefasst. Zur Berechnung der Suszeptibilitätsmatrix kann man auf die zum Lösen des GLS verwendete Jacobimatrix zurückgreifen.

Die von der Wechselwirkung stammenden Parameter sowie Λ werden gemäß Abschnitt 3.3 bestimmt. Sie sind in Tabelle 5.1 und Tabelle 5.2 gegeben.

| G_s [GeV ⁻²] | G_{s8} [GeV ⁻⁸] | Λ |
|----------------------------|-------------------------------|------------|
| 5,498 | 0.0 | 0,6315 GeV |
| 5,002 | 270.9 | 0,6315 GeV |

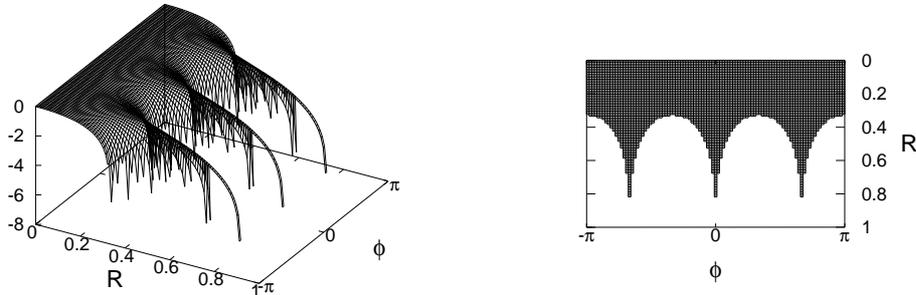
 Tabelle 5.1: Parametersets für $N_f = 2$ aus [16].

| G_{4q} [GeV ⁻²] | G_{6q} [GeV ⁻⁵] | Λ |
|-------------------------------|-------------------------------|------------|
| 9.206 | -92.575 | 0,6314 GeV |

 Tabelle 5.2: Parametersets für $N_f = 3$ aus [27].

Als nächstes muss ein N bestimmt werden, bei dem die numerische Integration zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Als Referenz wurden die Integralwerte von Mathematica genommen (siehe A.4). Für die endlichen Integrale wird $N = 100$ und für die unendlichen $N = 300$ angesetzt.

Da das Lösen des GLS empfindlich von den Anfangsbedingungen abhängt, werden im Programm verschiedene Startwerte durchlaufen, das GLS also mehrere Male gelöst. Dieses ist auch nötig, um ein globales Minimum zu finden und nicht fälschlicherweise ein lokales als richtige Lösung zu akzeptieren. Hierzu wird jeweils der Wert von Ω bei den gefundenen Lösungen verglichen. Um die Anfangsbedingungen sinnvoll zu setzen, muss man den Wertebereich der Variablen kennen. Der Betrag des Polyakovloops liegt per Definition zwischen 0 und 1, seine Phase wird auf $-\pi \leq \varphi \leq \pi$ eingeschränkt. Für die verschiedenen Kondensate wird anfangs der Wert bei $T = 0$ berechnet (dieser entspricht dem NJL-Ergebnis). Da für $T \rightarrow \infty$ die chirale Symmetrie wiederhergestellt wird, ist dies der maximal mögliche Wert. Des Weiteren sind sie entweder positiv oder negativ definit. Es ist auch möglich, die Startwerte abhängig vom Temperaturbereich zu setzen, um den Programmablauf zu beschleunigen. Schließlich muss man darauf achten, dass während der Berechnungen keine Divergenzen auftreten, besonders bei \mathcal{U}_1 kann dieses wegen des Logarithmusters passieren, welcher für große R nur bestimmte φ -Werte zulässt (ein Plot ist in Abbildung (5.1) gegeben).


 Abbildung 5.1: Der Logarithmsterm aus \mathcal{U}_1 bei Variation von R und ϕ in Schräg- und Aufsicht (ϕ entspricht φ)

6 Ergebnisse im Zweiflavourfall

In diesem Abschnitt wird nun das Potential Ω für $N_f = 2$ ausgewertet. Es wird der Fall von rein imaginärem chemischen Potential μ betrachtet. Bei den Simulationen wird die Stromquarkmasse m_0 variiert, in diesem Fall müssten streng genommen auch die anderen Parameter entsprechend geändert werden. Für eine erste Näherung wird diese Ungenauigkeit aber akzeptiert.

6.1 NJL-Modell

Zunächst wird der Spezialfall des NJL-Modells bei $\mu = 0$ betrachtet. Das NJL-Modell entsteht aus dem PNJL-Modell für $A_0 = 0$ und Ω wird gemäß (4.21) modifiziert. Man erhält

$$\Omega = -2N_f N_c \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \left[E(\mathbf{p}) + T \ln \left[1 + e^{-2\beta E} + e^{-\beta(E^+ + E^-)} \right] \right] + U + \mathcal{U}. \quad (6.1)$$

Hieran kann man sich die Wirkung der 8-Quark-Wechselwirkung veranschaulichen sowie qualitative Unterschiede ausmachen, die dadurch entstehen, ob man alle (Methode A) oder nur die divergenten Integrale (Methode B) regularisiert. Die einzig verbleibende Größe ist das skalare Kondensat σ . Die Ergebnisse finden sich in den Abbildungen 6.1 und 6.3. In beiden Abbildungen ist σ_0 der Wert des Kondensates bei $T = 0$ (siehe auch Tabelle A.1). Es wurde insgesamt mit drei verschiedene Massen simuliert: Der masselose Fall mit $m_0 = 0.0$ MeV, reale Quarkmassen ($m_0 = 5.5$ MeV) und schwere Quarks mit $m_0 = 600.0$ MeV. Bei verschwindendem m_0 erwartet man einen chiralen Übergang zweiter Ordnung, da das Modell bei $m_0 = 0$ die chirale Symmetrie erfüllt. Man erkennt ihn an divergierenden Suszeptibilitäten, was in Methode B allerdings undeutlicher zu erkennen ist als in Methode A (siehe Abbildung 6.2). Falls man jedoch den Gradienten von σ bezüglich T betrachtet, erkennt man deutlich einen Übergang zweiter Ordnung (Abbildung 6.4 zeigt diesen für die 4-Quark-Wechselwirkung). Bei den beiden anderen Massen sieht man einen Crossover. Der Übergang zeichnet sich hierbei durch ein lokales Maximum der Suszeptibilität aus, welcher in Methode B ebenfalls besser am Gradienten abzulesen ist.

Im Vergleich der beiden Regularisierungsmethoden fällt auf, dass bei Methode A die Suszeptibilitäten deutlichere Maxima ausbilden. Dadurch, dass nur das divergente Integral regularisiert wird, fällt das chirale Kondensat schärfer ab und die Übergänge werden bei Methode B im Vergleich zu Methode A zu niedrigeren Temperaturen verschoben. So liegt bei $m_0 = 600$ MeV der Übergang noch im betrachteten Temperaturintervall, bei Methode A ist σ bei $T = 400$ MeV erst auf ca. 10% von σ_0 abgefallen. Gleiche Wirkung hat die zusätzliche Wechselwirkung G_{s8} , die Unterschiede liegen jeweils bei ungefähr 30 MeV. In [16] wird der Einfluß der Wechselwirkung bei reellem μ untersucht. Die hier erhaltenen Ergebnisse decken sich mit diesen im Fall $\mu = 0$.

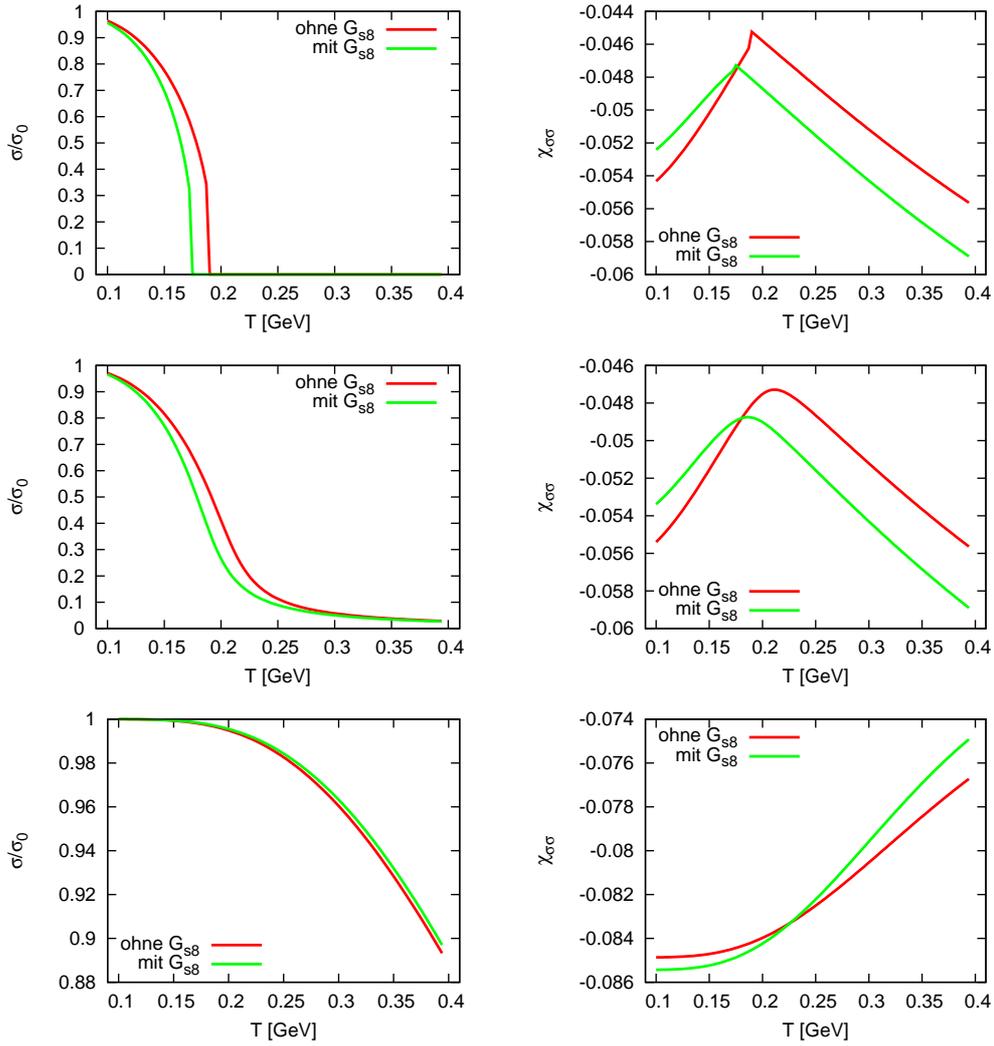


Abbildung 6.1: Chirales Kondensat σ für das NJL-Modell bei zwei Flavours mit jeweils unterschiedlichen Wechselwirkungen und variierenden Massen: $m_0 = 0.0, 5.5$ und 600.0 MeV . Alle Integrale wurden regularisiert (Methode A).

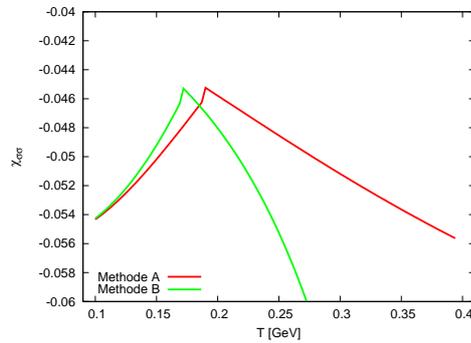


Abbildung 6.2: Suszeptibilitäten von σ für $m_0 = 0.0 \text{ MeV}$ unter Verwendung von Regularisierungsmethode A und B.

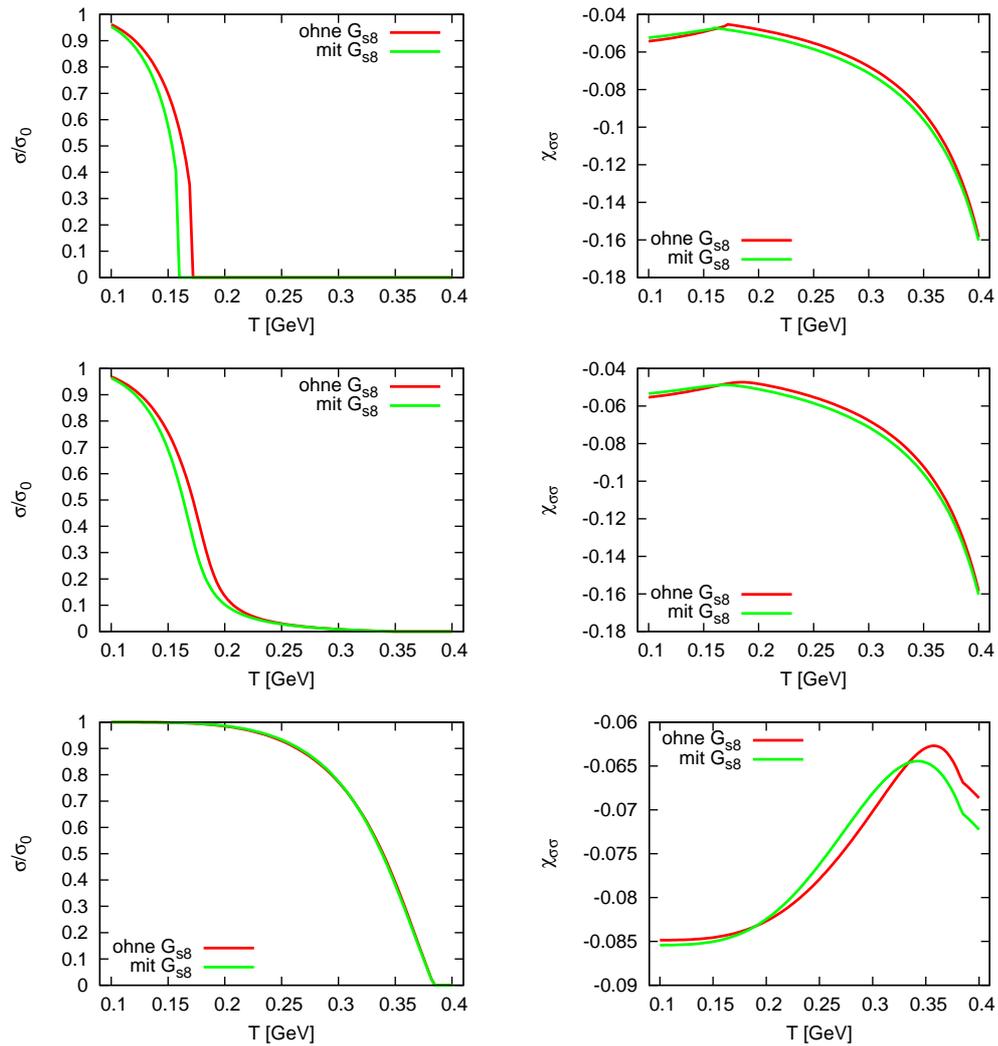


Abbildung 6.3: Chirales Kondensat σ für das NJL-Modell bei zwei Flavours mit jeweils unterschiedlichen Wechselwirkungen und variierenden Massen: $m_0 = 0.0, 5.5$ und 600.0 MeV. Nur divergente Integrale wurden mit einem Cut-Off regularisiert (Methode B).

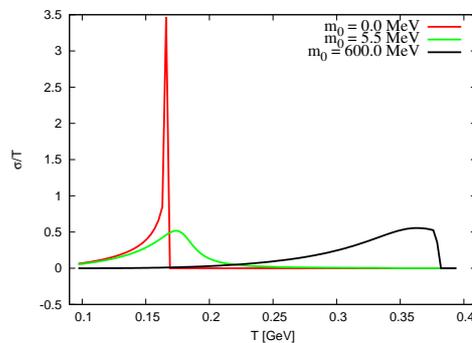


Abbildung 6.4: Gradient von σ ($m_0 = 0.0, 5.5$ und 600.0 MeV).

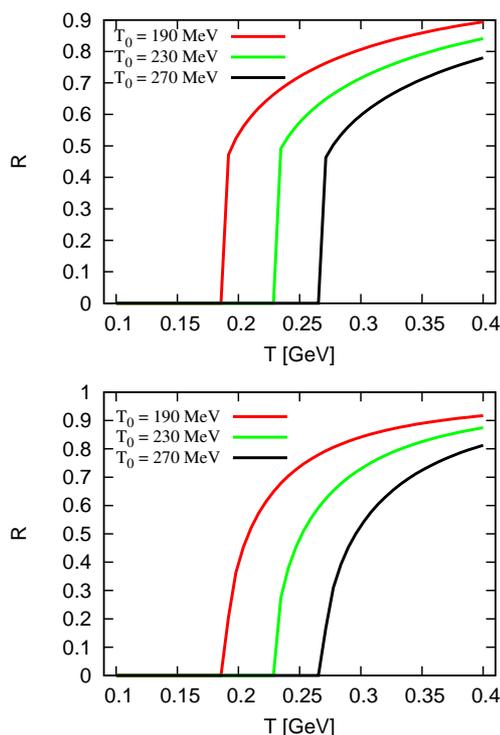


Abbildung 6.5: Das Minimum von \mathcal{U}_1 und \mathcal{U}_2 für verschiedene Phasenübergangsparameter T_0 : 190 MeV, 230 MeV und 270 MeV.

6.2 Reine Eichtheorie

Analog zur obigen Diskussion des NJL-Modells lassen sich die Quarks „ausschalten“ und man erhält die reine Eichtheorie als Grenzfall unendlich schwerer Quarks, was durch die beiden Potentiale (3.31) und (3.32) beschrieben wird. Der Phasenübergang kann in \mathcal{U}_1 und \mathcal{U}_2 über T_0 direkt eingestellt werden. Es handelt sich um einen Übergang erster Ordnung, der Erwartungswert des Polyakovloops springt bei einer Temperatur T_c von Null auf einen endlichen Wert. Abbildung 6.5 zeigt diesen Übergang für verschiedene kritische Temperaturen. Bei Anwesenheit von dynamischen Quarks wird er, wie bereits erwähnt, zu einem Crossover. Durch den Logarithmuserm ist in \mathcal{U}_1 der Betrag des Polyakovloops stets kleiner als Eins, bei \mathcal{U}_2 gibt es keine solche Einschränkung. Es wurde mit den drei Werte 190, 230 und 270 MeV simuliert. Die Suszeptibilitäten sowie die Phase des Polyakovloops ergeben sich zu Abbildung 6.6. Hier erkennt man Unterschiede zwischen den beiden Potentialansätzen. Der Polynomialansatz hat einen deutlich ausgeprägteren Peak in der Polyakovloop-Suszeptibilität, und auch die Phase ist durchweg bei einem der 3 erwarteten Minima ($0 \bmod 2\pi/3$), wohingegen sie beim logarithmischen Ansatz in der Confinementphase zwischen ($0 \bmod 2\pi/3$) und $-\pi$ variiert, was physikalisch möglich ist, da bei verschwindendem Betrag des Polyakovloops die Phase unerheblich ist. Da die Suszeptibilität der zweiten Ableitung von \mathcal{U} entspricht, ist ersteres mit der komplizierteren Struktur der Logarithmusableitung zu erklären, χ_{RR} divergiert für $T \rightarrow 0$.

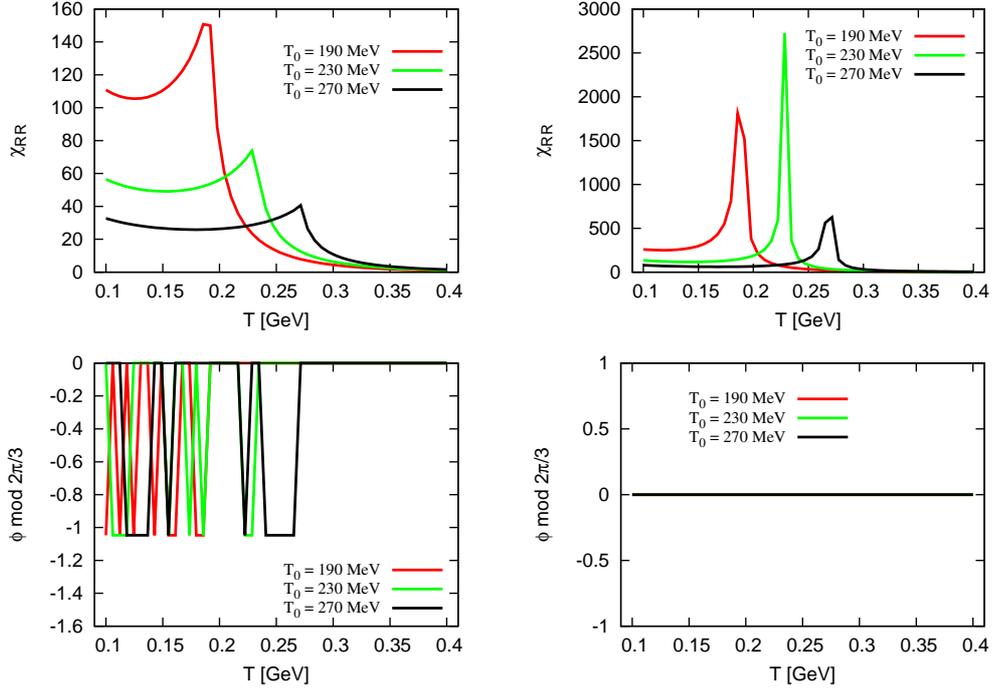


Abbildung 6.6: Verhalten der Suszeptibilitäten beim Phasenübergang der Polyakovlooppotentiale \mathcal{U}_1 und \mathcal{U}_2 sowie die Phase des Polyakovloops.

6.3 Verschwindendes chemisches Potential

Nun wird das volle PNJL-Modell bei $\mu = 0$ betrachtet. Aus den vorigen Überlegungen ist bekannt, dass die Phase des Polyakovloops in diesem Fall verschwindet, man muss also ein zweidimensionales Gleichungssystem mit Variable $|\Phi| = R$ und σ lösen. Es wird im Folgenden \mathcal{U}_2 verwendet.

Im Modell kann die kritische Temperatur T_0 des Übergangs der reinen Eichtheorie variiert werden. Für das Gitterergebnis $T_0 = 0.27$ GeV sieht man (Abbildung 6.7), dass der Polyakovloopübergang von der zusätzlichen Wechselwirkung G_{s8} unbeeinträchtigt ist. Im Vergleich zum NJL-Modell reagiert der chirale Übergang aufgrund der Anwesenheit des Polyakovloops schwächer auf G_{s8} , der Unterschied beträgt ca. 10 MeV. Sowohl der chirale Übergang als auch der Polyakovloopübergang finden für reale Quarkmassen bei ca. 225 MeV statt. Der Gitterwert liegt jedoch etwas niedriger (ca. 170 MeV [8]). Von daher ist es üblich, einen anderen Wert für T_0 zu benutzen. Denn für eine kritische Temperatur von 190 MeV in reiner Eichtheorie verringern sich die Übergangstemperaturen im PNJL-Modell (Abbildung 6.8). Man verliert zwar den gleichzeitigen Übergang von R (ca. 160 MeV) und σ (ca. 185 MeV), jedoch liegt der Mittelwert T_c dann bei ca. 173 MeV und passt somit zum Gitterresultat, im Folgenden wird $T_0 = 190$ MeV verwendet. Diese Beobachtung ist übereinstimmend mit [8], allerdings wurden dort leicht unterschiedliche Parametereinstellungen benutzt, was auf $T_c \approx 180$ MeV führte.

Ab einer Temperatur von ca. 0.3 GeV wird allerdings der physikalisch sinnvolle Bereich verlassen, da der Polyakovloop dort Werte größer als Eins annimmt. Dieses ist mit dem verwendeten Potential \mathcal{U}_2 zu erklären, welches diese Werte zulässt.

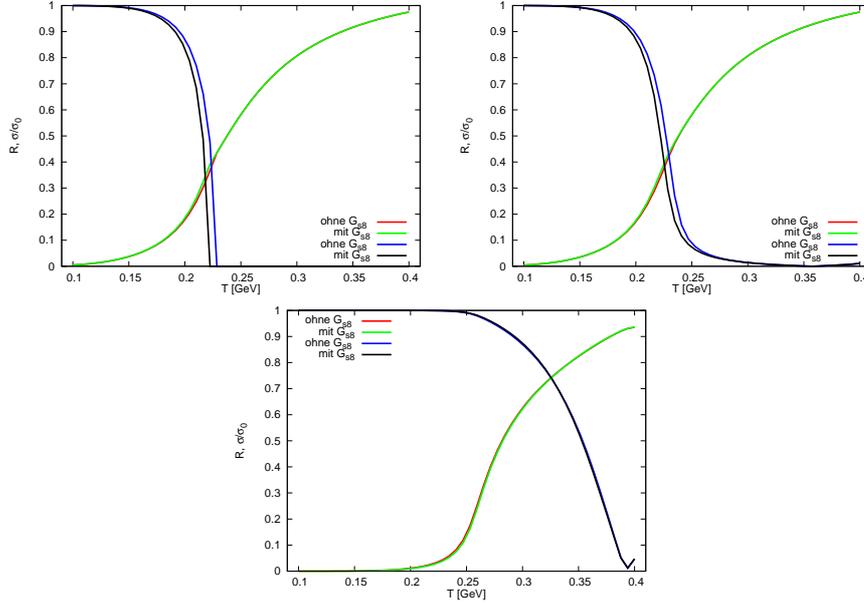


Abbildung 6.7: Verhalten der auf σ_0 normierten chiralen Kondensats (absteigend) und des Polyakovloops (aufsteigend) für $m_0 = 0.0, 5.5$ und 600.0 MeV und $\mu = 0$ unter Verwendung von \mathcal{U}_2 ($T_0 = 270$ MeV).

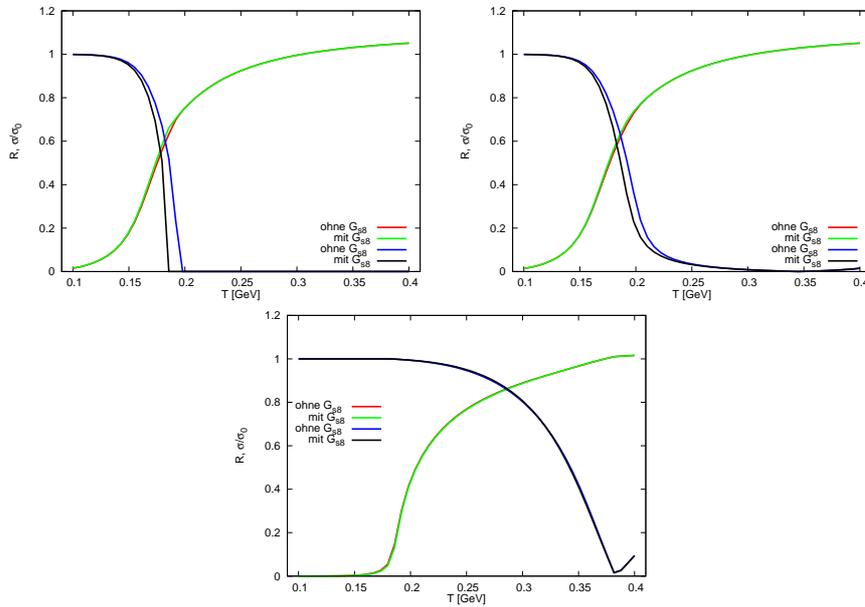


Abbildung 6.8: Verhalten der auf σ_0 normierten chiralen Kondensats (absteigend) und des Polyakovloops (aufsteigend) für $m_0 = 0.0, 5.5$ und 600.0 MeV und $\mu = 0$ unter Verwendung von \mathcal{U}_2 ($T_0 = 190$ MeV).

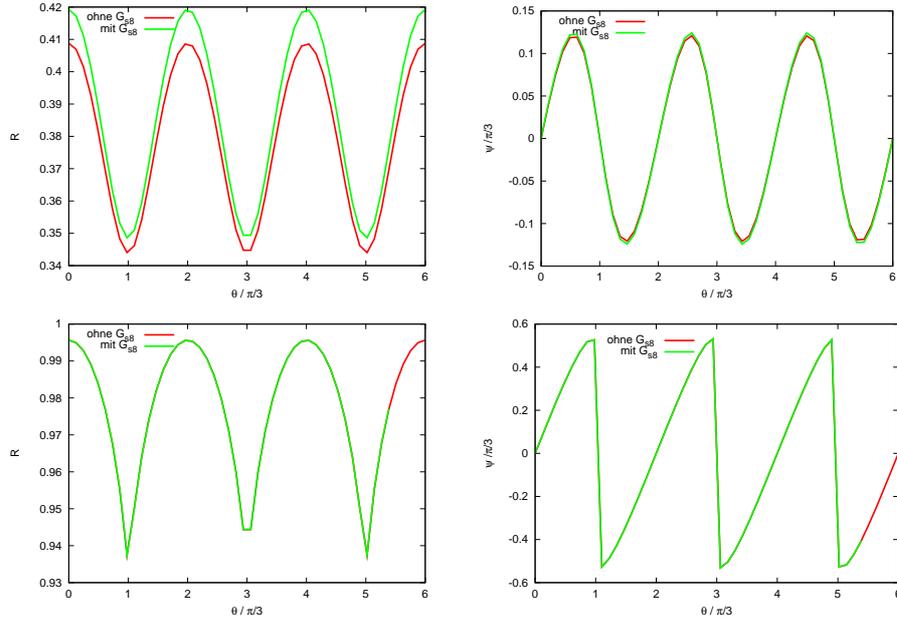


Abbildung 6.9: Betrag und Phase des (modifizierten) Polyakovloops bei $T = 170$ und 300 MeV für $m_0 = 5.5$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_2 ($T_0 = 190$ MeV).

6.4 Roberge-Weiss-Periodizität

Das chemische Potential $\mu = i\theta/T$ ist rein imaginär. Für $\theta \neq 0$ verschwindet die Phase des Polyakovloops nicht, so dass das zu lösende Gleichungssystem nun dreidimensional wird. Der Konsistenzcheck ($\mu = 0$) zu obigen Simulationen liefert dieselben Resultate. Für $m_0 = 5.5$ MeV wird nun θ bei konstanter Temperatur variiert. Im Folgenden wird der oben bereits eingeführte modifizierte Polyakovloop $\Psi = \Phi e^{i\theta} = R e^{i\psi}$ verwendet.

Die Resultate zeigen die RW-Periodizität und den RW-Phasenübergang: Unterhalb von dessen Übergangstemperatur sind sowohl die ungeraden als auch die geraden Systemvariablen stetig. Oberhalb bilden die geraden bei $\theta = \pi/3$ und Vielfachen hiervon einen Cusp-Punkt aus, wohingegen die ungeraden Systemvariablen hier unstetiges Verhalten zeigen (Abbildung 6.9 zeigt dieses Verhalten für R und ψ). Abbildung 6.10 zeigt, dass σ an den Übergängen ebenfalls Cusp-Singularitäten ausbilden, dementsprechend unstetig ist die Ableitung an diesem Punkt. Es gibt also einen Unterschied zwischen dem RW-Übergang des Polyakovloops Ψ und dem des chiralen Kondensates. Ersterer ist wegen des Verhaltens der Phase ψ ein Übergang erster Ordnung, Letzterer ein Übergang zweiter Ordnung. Wegen des chiralen Übergangs verschwindet er ab einem gewissen Punkt.

Den Einfluss von G_{s8} erkennt man ebenfalls deutlich. In den Übergangsbereichen ist Φ unbeeinflusst von der zusätzlichen Wechselwirkung, im Gegensatz zu σ , dessen Werte stets abgesenkt werden. Somit bestätigt sich obige Schlußfolgerung, dass der chirale Übergang von G_{s8} zu niedrigeren Temperaturen verschoben wird.

Die Übergangstemperaturen des chiralen Übergangs und des Deconfinementübergangs des Polyakovloops variieren ebenfalls mit θ . Dieses erkennt man z.B. am Verhalten von σ in Abbildung 6.10. Während z.B. für $T = 230$ MeV σ bei $\theta = 0$ noch

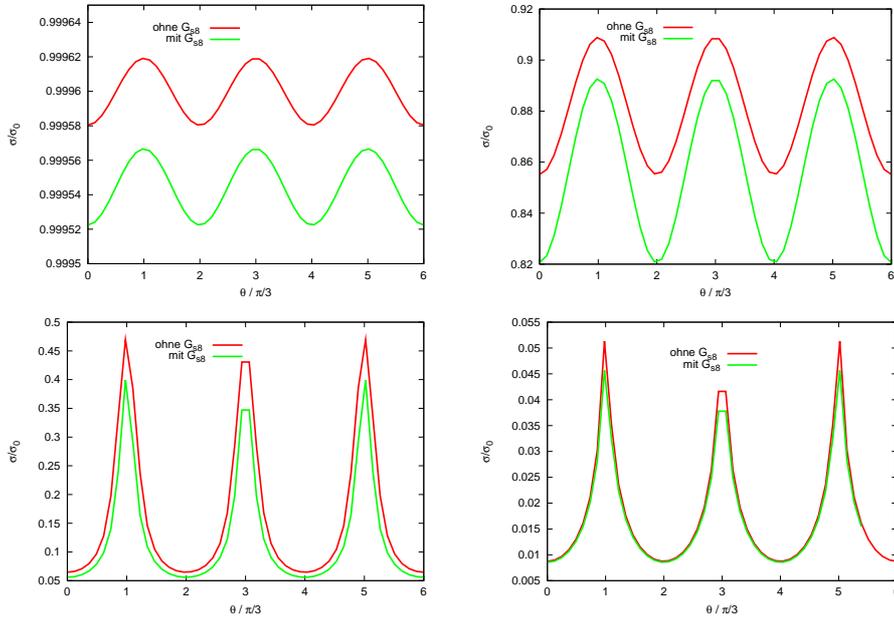


Abbildung 6.10: Auf σ_0 normiertes chirales Kondensat σ bei $T = 100, 170, 230$ und 300 MeV für $m_0 = 5.5$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_2 ($T_0 = 190$ MeV).

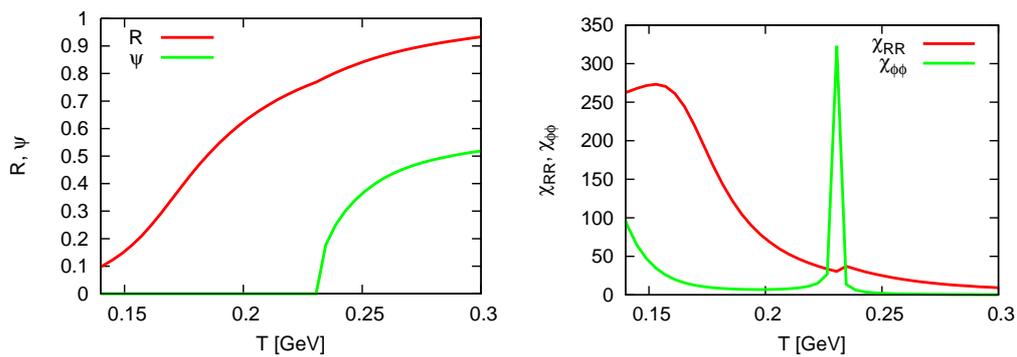


Abbildung 6.11: Betrag und Phase des (modifizierten) Polyakovloops und die jeweilige Suszeptibilität bei $\theta = \pi/3$ für $m_0 = 5.5$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_2 ($T_0 = 190$ MeV).

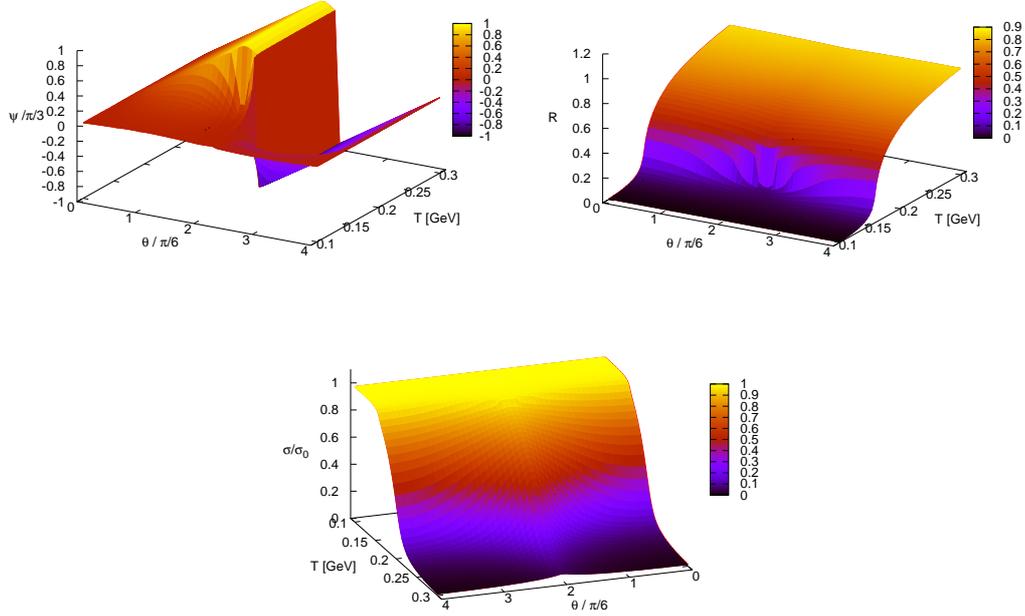


Abbildung 6.12: Phase und Betrag des (modifizierten) Polyakovloops und σ/σ_0 bei gleichzeitiger Variation von T und θ für $m_0 = 5.5$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_1 ($T_0 = 190$ MeV).

5% von σ_0 beträgt (und somit der Crossoverübergang schon stattgefunden hat), liegt dieser Wert bei $\theta = \pi/3$ noch bei über 40%. Der Deconfinementübergang hängt nur sehr schwach von θ ab, was hier zu erwarten war, da \mathcal{U}_2 nicht von θ abhängt.

Der Punkt des RW-Phasenübergangs wird dadurch festgelegt, dass bezüglich θ ungerade Systemgrößen an diesem Punkt einen von Null verschiedenen Wert annehmen. Die Phase des Polyakovloops, ψ , ist eine solche Größe und somit ein Ordnungsparameter für diesen Übergang. Wenn man sich nun auf die RW-Phasenlinie bei $\theta = \pi/3$ setzt, sieht man, dass dieser Übergang bei $T \approx 230$ MeV stattfindet (Abbildung 6.11). Es sind sowohl positive als auch negative Werte von ψ möglich, beide Phasen sind physikalisch gleichwertig. Es zeigt sich hier jedoch, dass Deconfinement- und RW-Übergang nicht simultan stattfinden. Eine Änderung von T_0 verschiebt sowohl den RW- als auch den Deconfinementübergang: Für $T_0 = 270$ MeV findet der Übergang bei ca. 230 bzw. 315 MeV statt.

Diese grundsätzlichen Beobachtungen decken sich mit [7] bis auf die Tatsache, dass RW- und Deconfinementübergang nicht zusammenfallen, was allerdings der Fall sein sollte. In [7] wurde Regularisierungsmethode A angewendet, daher scheint \mathcal{U}_2 mit Methode B unzulänglich zu sein. Bei Verwendung von \mathcal{U}_1 dagegen ist der Übergang gleichzeitig (siehe Abbildung 6.12): Bei $T \approx 173$ MeV findet bei $\theta = \pi/3$ simultan ein Phasenübergang zweiter Ordnung in der Phase und im Betrag des Polyakovloops auf, in Übereinstimmung mit [20]. Entsprechend ist also der Endpunkt der RW-Phasenlinie zweiter Ordnung. Der Potentialansatz \mathcal{U}_1 scheint deswegen und wegen der Einschränkung von $|\Phi|$ auf Werte kleiner als Eins die geeignetere Wahl zu sein und wird von nun

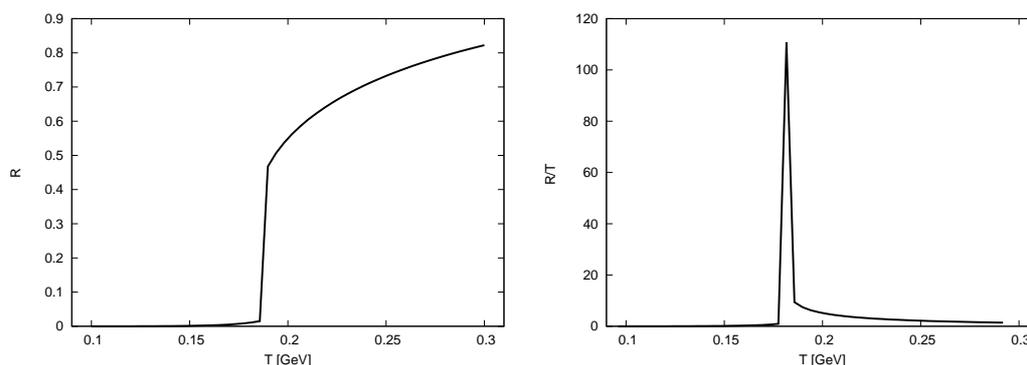


Abbildung 6.13: Betrag und Gradient des (modifizierten) Polyakovloops für $m_0 = 600$ MeV bei $\mu = 0$ unter Verwendung von \mathcal{U}_1 ($T_0 = 190$ MeV).

an verwendet. In Abbildung 6.12 erkennt man klar den RW-Übergang erster Ordnung in der Phase bei Variation von θ . Es wurde sich auf einen θ -Bereich von 0 bis $2\pi/3$ beschränkt, danach wiederholen sich die Werte. Man sieht ebenfalls die Variation sowohl des chiralen Übergangs als auch die des Deconfinementübergangs bei Änderung von θ . Das durch die Phasenübergänge der in Abbildung 6.12 gezeigten Größen aufgespannte Phasendiagramm entspricht qualitativ den in [7] und [20] erstellten (siehe auch Abbildung 1.2), quantitative Unterschiede werden durch verschiedene Parameter und verschiedene Ansätze für \mathcal{U} erklärt.

6.5 Variation der Masse

Bisher wurde $\theta \neq 0$ für reale Quarkmassen, $m_0 = 5.5$ MeV, betrachtet. Nun wird dieser Wert variiert. Das Verhalten in den beiden Grenzfällen für verschwindende und schwere Quarkmassen zeigt Abbildung 6.14. Man erkennt den chiralen Übergang zweiter Ordnung im masselosen Fall, bei den 600 MeV schweren Quarks ist dieser erst für sehr hohe T zu erwarten. Der Deconfinementübergang liegt für masselose Quarks bei $T_c \approx 157$ MeV ($\mu = 0$). Im Fall schwerer Quarks ist der Deconfinementübergang erster Ordnung (Abbildung 6.13 zeigt hierzu Betrag und Gradienten bei $\theta = 0$) und hängt nicht von θ ab. Im Vergleich zum mit \mathcal{U}_2 erhaltenen Ergebnis (Abbildung 6.8) erkennt man einen weiteren Unterschied zwischen beiden Potentialansätzen: Es fällt sofort auf, dass der Übergang bei Verwendung von \mathcal{U}_2 noch ein Crossover ist, ein Übergang erster Ordnung ist für höhere Massen zu erwarten. \mathcal{U}_1 scheint daher sensibler auf die Quarkmasse zu reagieren als \mathcal{U}_2 . Das Ansteigen der Übergangstemperatur ($T_c \approx 157$ MeV bei masselosen Quarks, $T_c \approx 159$ MeV bei $m_0 = 5.5$ MeV und $T_c \approx 185$ MeV bei $m_0 = 600$ MeV, jeweils bei $\mu = 0$) zeigt die Annäherung an den Grenzfall unendlich schwerer Quarks, in welchem der Übergang erster Ordnung bei $T_0 = 190$ MeV erwartet wird. Für $N_f = 2$ reproduziert das Modell also das für die QCD erwartete Verhalten bei Variation der Masse (vergleiche Abbildung 2.3 links).

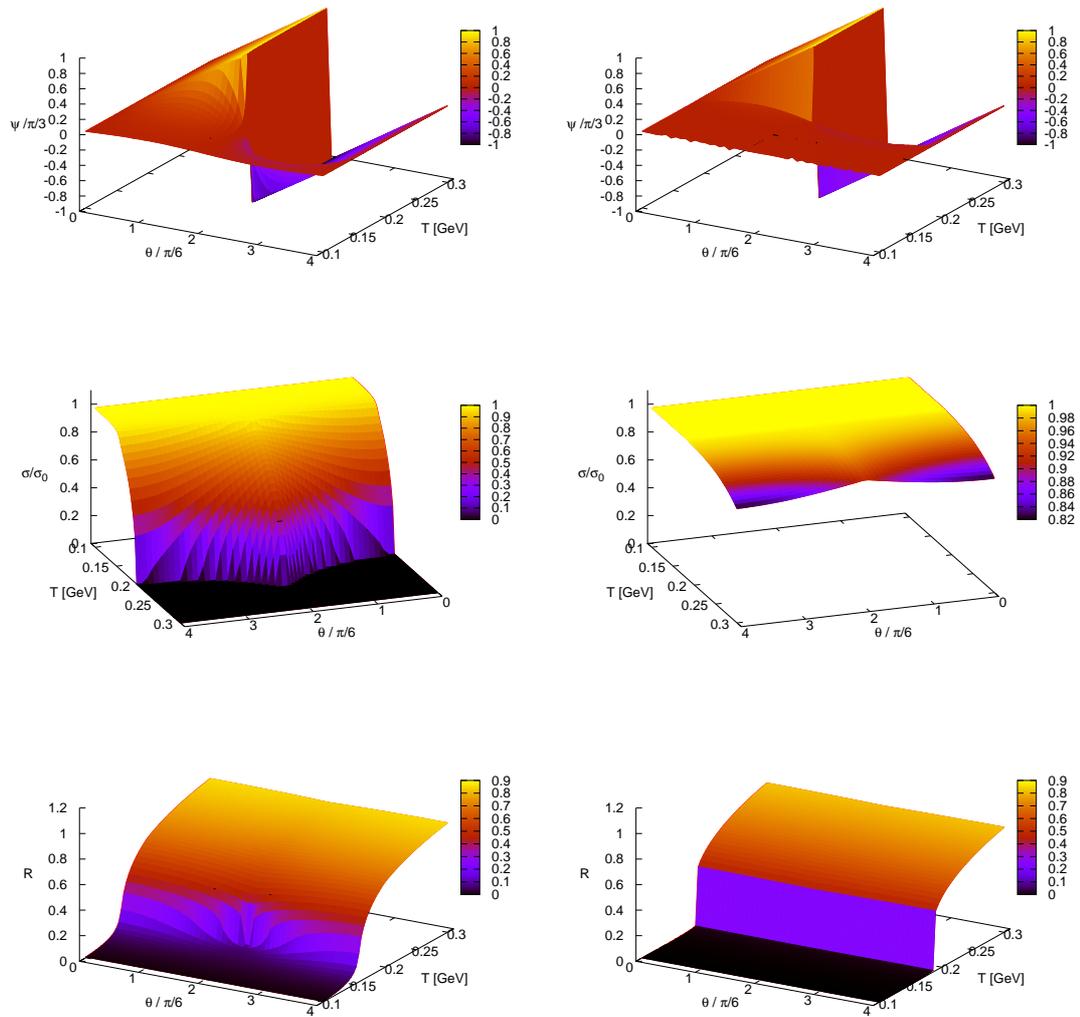


Abbildung 6.14: Betrag, Phase des (modifizierten) Polyakovloops und σ für $m_0 = 0$ und 600 MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_1 ($T_0 = 190$ MeV).

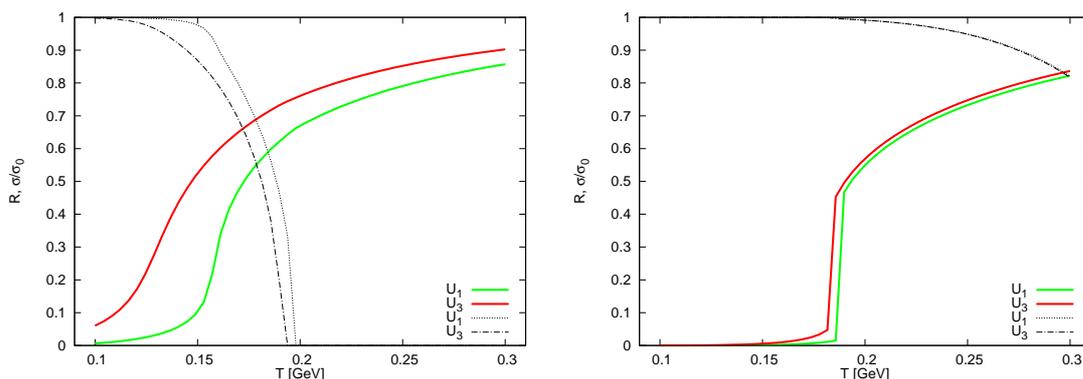


Abbildung 6.15: Einfluss des zusätzlichen Terms in \mathcal{U}_3 auf das Verhalten des auf σ_0 normierten chiralen Kondensats (absteigend) und des Polyakovloops (aufsteigend) für $m_0 = 0$ und 600 MeV und $\mu = 0$ unter Verwendung von \mathcal{U}_1 ($T_0 = 190$ MeV).

6.6 Einfluss des Polyakovlooppotentials \mathcal{U}_3

Der Erweiterung \mathcal{U}_3 für das Polyakovlooppotential stellt eine Möglichkeit dar, Polyakovloop und chemisches Potential zu koppeln, was in \mathcal{U}_1 und \mathcal{U}_2 nicht der Fall ist. Die Masse des Quarks kommt über einen Faktor $e^{-\beta m}$ in diese Erweiterung hinein, stellt also eine Dämpfung dar. Abbildung 6.15 zeigt die Unterschiede zu den allein mit \mathcal{U}_1 beobachteten Werten für verschwindendes chemisches Potential. Man erkennt deutlich, dass \mathcal{U}_3 die Übergänge zu niedrigeren Temperaturen verschiebt, gleichwohl dies bei $m_0 = 600$ MeV nur minimal der Fall ist; hier unterdrückt die durch die Masse verursachte Dämpfung den Zusatzterm bereits deutlich. Im anderen abgebildeten Fall von $m_0 = 0$ MeV ist diese Dämpfung vollkommen unterdrückt, der Deconfinementübergang liegt dann um 32 MeV unter dem vorherigen. Durch Ändern des Parameters T_0 auf 240 MeV kann diese Verschiebung wieder ausgeglichen werden. Es fällt auf, dass der Übergang bei Verwendung von \mathcal{U}_3 nicht mehr so schnell abläuft, was man am langsameren Anwachsen der Kurve erkennt. Durch den zusätzlichen Beitrag des Polyakovloops ähnelt der Verlauf eher dem des Polynomialansatzes \mathcal{U}_2 . Der chirale Übergang wird nur leicht beeinflusst und um 4 MeV verschoben. Bei Variation von θ ergibt sich bis auf die oben beschriebenen Änderungen dasselbe Bild wie ohne \mathcal{U}_3 .

7 Ergebnisse im Dreiflavourfall

Es wird im Folgenden zusätzlich zu den beiden masseentarteten Up- und Down-Quarks das Strange-Quark betrachtet und das Potential Ω für drei Flavours ausgewertet.

Hierbei wird zwischen zwei Fällen unterschieden: Zwei masseentartete und ein verschieden schweres Quark ($N_f = 2 + 1$ genannt) sowie drei masseentartete Quarks ($N_f = 3$).

7.1 NJL-Modell

Zunächst lässt sich auch hier der Grenzfall des NJL-Modells betrachten, was auf dieselbe Struktur (6.1) führt wie im Zweiflavourfall. Da jedoch nun zwei im Allgemeinen verschieden schwere Quarks betrachtet werden, ist das zu lösende Gleichungssystem im Gegensatz zum weiter oben betrachteten Fall prinzipiell zweidimensional. Für reale Quarkmassen ($m_0 = 5.5$ MeV und $m_s = 135.7$ MeV) zeigt Abbildung 7.1, dass der chirale Übergang beim Kondensat des schweren Quarks σ_s erwartungsgemäß langsamer stattfindet als bei dem der leichten Quarks, σ . Beides sind Crossover-Übergänge, wobei der Peak in der Suszeptibilität bei σ stärker ausgeprägt ist. Die Ergebnisse decken sich mit [39].

Beide Massen lassen sich unabhängig voneinander variieren, wobei sich beide Kondensate bei identischen Massen gleich verhalten. Es besteht jedoch keine „Spiegelsymmetrie“ bei Vertauschen von m_s und m_0 , da jeweils zwei Quarks dieselbe Masse haben. Für verschwindende Quarkmassen beobachtet man einen chiralen Phasenübergang zweiter Ordnung. Dieses erwartet man analog zum Zweiflavourfall, da das NJL-Modell dann gerade die chirale Symmetrie erfüllt. Bei Verwendung von höheren Quarkmassen verschieben sich die Übergänge zu höheren Temperaturen. Die Werte der chiralen Kondensate bei $T = 0$ finden sich in Tabelle A.2.

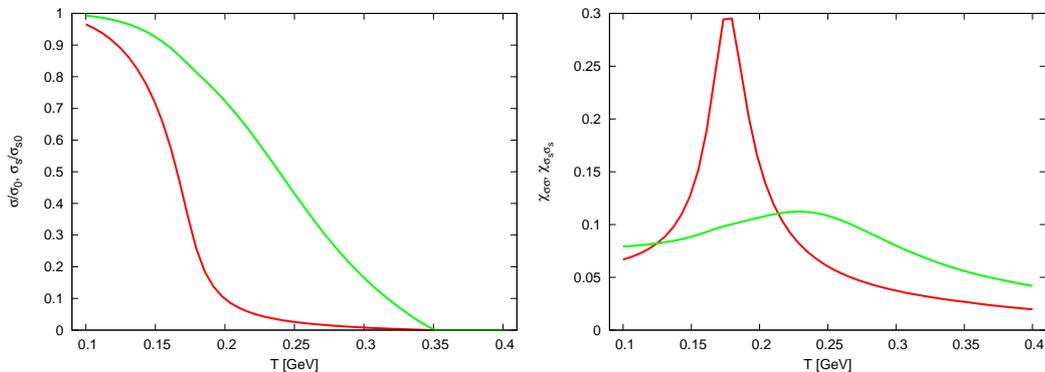


Abbildung 7.1: Normierte chirale Kondensate im NJL-Modell für $m_0 = 5.5$ MeV und $m_s = 135.7$ MeV und deren Suszeptibilitäten.

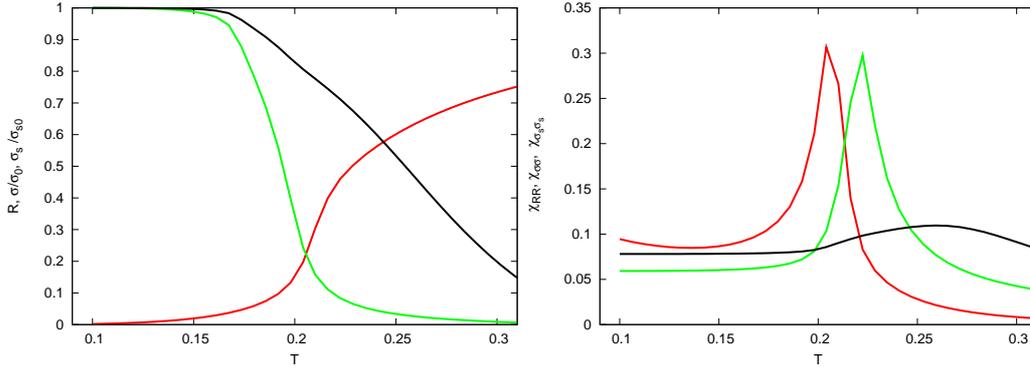


Abbildung 7.2: Betrag des Polyakovloops (aufsteigend) und die normierten chiralen Kondensate für $m_0 = 5.5$ MeV und $m_s = 135.7$ MeV (absteigend) sowie die zugehörigen Suszeptibilitäten unter Verwendung von \mathcal{U}_1 bei $T_0 = 270$ MeV. Das Kondensat der leichten Quarks fällt schneller ab.

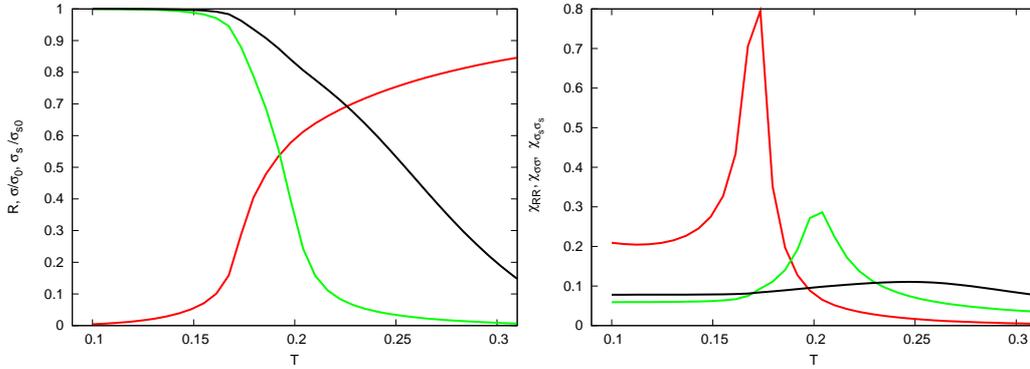


Abbildung 7.3: Betrag des Polyakovloops (aufsteigend) und die normierten chiralen Kondensate für $m_0 = 5.5$ MeV und $m_s = 135.7$ MeV (absteigend) sowie die zugehörigen Suszeptibilitäten unter Verwendung von \mathcal{U}_1 bei $T_0 = 215$ MeV. Das Kondensat der leichten Quarks fällt schneller ab.

7.2 Verschwindendes chemisches Potential

Betrachtet man nun das PNJL-Modell, weiß man analog zum Zweiflavourfall, dass die Phase des Polyakovloops bei $\mu = 0$ verschwindet und das zu lösende Gleichungssystem daher um eine Dimension verkleinert wird. Für eine Übergangstemperatur von 270 MeV in der reinen Eichtheorie decken sich die Ergebnisse mit [27] (Abbildung 7.2). Der Deconfinementübergang findet bei ca. 205 MeV statt, der chirale Übergang der leichten Quarks bei 220 MeV. Um ersteren zu niedrigeren Temperaturen zu verschieben wird, [25] folgend, $T_0 = 215$ MeV gesetzt. Diese Wahl bewirkt eine Absenkung dieses Übergangs auf $T \approx 170$ MeV, des chiralen Übergangs auf ca. 200 MeV (Abbildung 7.3). Dieses Vorgehen ist ganz analog zum Zweiflavourfall. Bei beiden Übergängen handelt es sich wie erwartet um Crossover-Übergänge (siehe auch Abbildung 2.3 rechts).

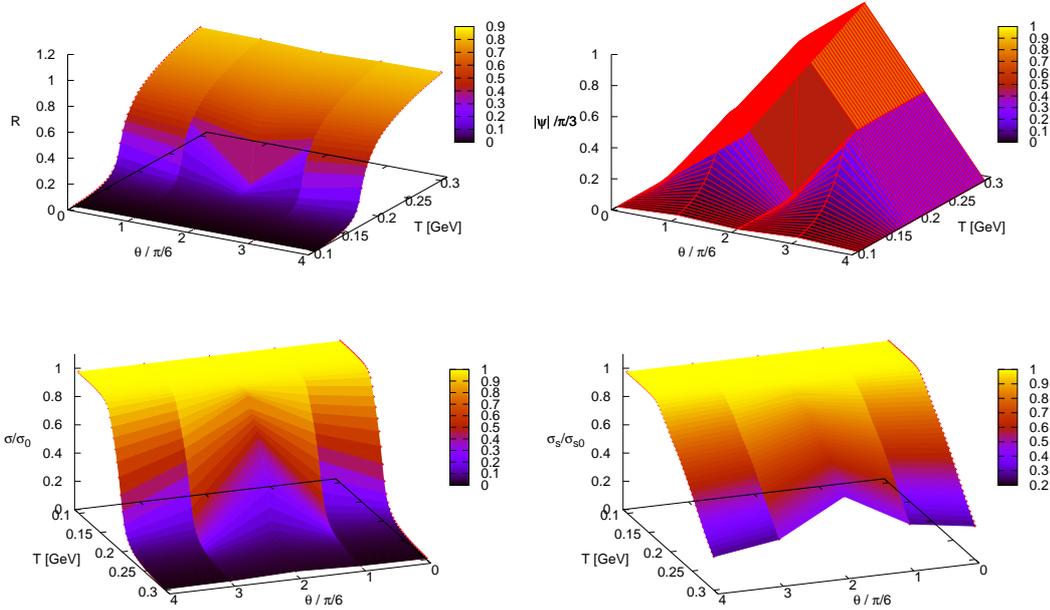


Abbildung 7.4: Betrag des (modifizierten) Polyakovloops und der Betrag dessen Phase sowie σ/σ_0 und σ_s/σ_{s0} für $m_0 = 5.5$ und $m_s = 135.7$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_1 ($T_0 = 215$ MeV).

7.3 Imaginäres chemisches Potential

Wird nun das chemische Potential μ variiert, erhält man ein Ergebnis analog zum Zweiflavourfall (Abbildung 7.4). Man erkennt ebenfalls den RW-Übergang bei $T \approx 191$ MeV, welcher mit dem Deconfinementübergang zusammenfällt und zweiter Ordnung ist. Hier ist der Betrag $|\psi|$ der Phase des Polyakovloops gezeigt. Man erkennt so deutlich, dass sich die Werte von ψ um $\theta = \pi/3$ herum nur um das Vorzeichen unterscheidet, das Verhalten von ψ entspricht ansonsten den im Zweiflavourfall beobachteten Phasen. Wie nach dem Ergebnis aus $\mu = 0$ zu erwarten war, verschwindet das chirale Kondensat der leichten Quarks abhängig von θ , während σ_s viel langsamer abfällt. Letzteres ist stärker von θ abhängig als sein Gegenstück. Ober- und unterhalb der RW-Übergangstemperatur zeigen die jeweiligen Größen also ein zum Zweiflavourfall analoges Verhalten.

7.4 Drei masseentartete Quarks: Roberge-Weiss-Symmetrie

Nun wird der $N_f = 3$ -Fall bei imaginärem chemischen Potential μ betrachtet. Da die Quarks ununterscheidbar sind, gibt es nun ein einziges chirales Kondensat σ . Basierend auf Ergebnissen aus Gittersimulationen der QCD für zwei Flavours wurde in [42] die Hypothese aufgestellt, dass bei leichten sowie bei schweren Quarkmassen der Endpunkt der RW-Übergangslinie erster Ordnung ist. Dieses würde bedeuten, dass von ihm neben der aus dem Zweiflavourfall bekannten Linie mit Übergängen erster Ordnung weitere

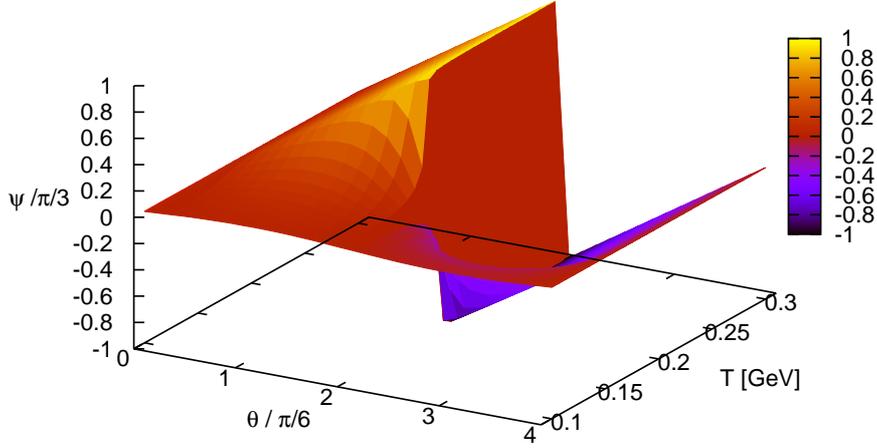


Abbildung 7.5: Phase des (modifizierten) Polyakovloops für $m_0 = 5.5$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_1 bei $T_0 = 215$ MeV.

solche Linien existieren. Diese Linien würden sich, ähnlich zu den bereits beobachteten, in Unstetigkeiten bei $\theta \neq \pi/3$ und Vielfachen hiervon bemerkbar machen.

Das thermodynamische Potential Ω ergibt sich analog zum Zweiflavourfall, nur dass die zusätzliche 6-Quark-Wechselwirkung des chiralen Kondensats unterschiedliche σ -Terme induziert. Man erkennt auch hier deutlich den RW-Übergang (Abbildung 7.5). Bei niedrigen Teperaturen ist die Phase periodisch, wohingegen sie nach einem Übergang bei $T \approx 195$ MeV an der Stelle $\theta = \pi/3$ und Vielfachen hiervon unstetig ist. Allerdings ist keiner von den oben erwähnten weiteren Übergängen zu beobachten; das sich ergebende Bild entspricht qualitativ dem $N_f = 2$ -Fall, vergleiche hierzu auch Abbildung 7.6.

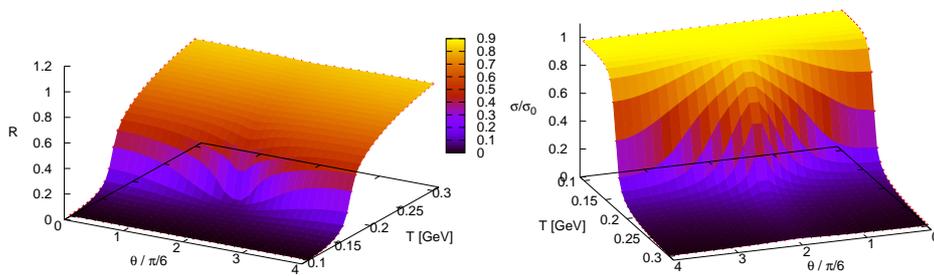


Abbildung 7.6: Betrag des (modifizierten) Polyakovloops und das normierte chirale Kondensat für $m_0 = 5.5$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_1 bei $T_0 = 215$ MeV.

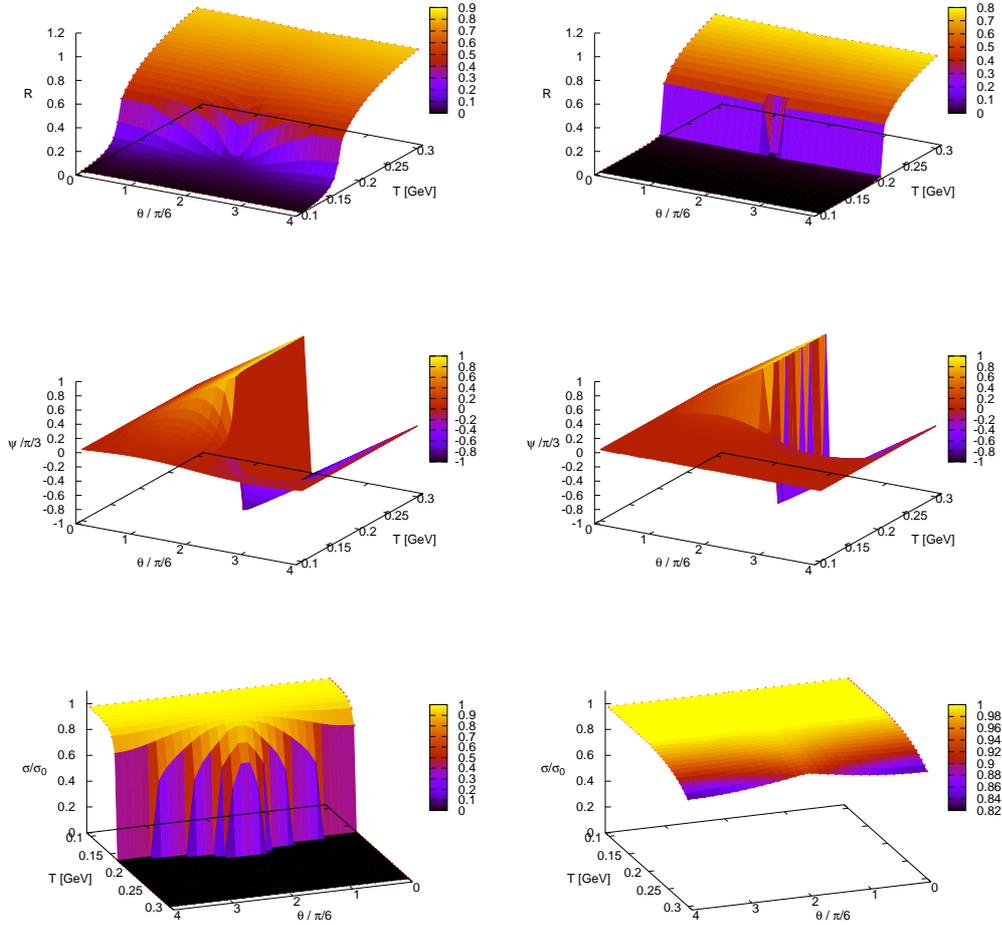


Abbildung 7.7: Betrag und Phase des (modifizierten) Polyakovloops sowie σ/σ_0 für $m_0 = 0$ und 600 MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_1 ($T_0 = 215$ MeV).

7.5 Drei masseentartete Quarks: Variation der Masse

Die Masse der drei gleichschweren Quarks kann nun ebenfalls variiert werden. Auch hier ergibt sich qualitativ dieselbe Phasenstruktur wie im Zweiflavourfall (siehe Abbildung 7.7). Der chirale Übergang im masselosen Fall ist zweiter Ordnung, während er bei 600 MeV schweren Quarks noch nicht stattgefunden hat. Beim Deconfinementübergang sieht man ebenfalls eine Annäherung an die reine Eichtheorie. Letzterer ist jedoch stärker von θ abhängig als bei zwei Flavours, um die RW-Phasenlinie herum liegt er bei höheren T als bei den übrigen θ -Werten. Die Ausprägung dieser „Einbuchtung“ läßt sich bei steigenden Werten von m_0 gut beobachten (Dies wurde bei $m_0 = 0.0, 5.5, 50.0, 135.7$ und 600.0 MeV getan). Wiederum gibt es keine Hinweise auf die Existenz von im Unterschied zum Zweiflavourfall neu auftretenden Phasenstrukturen, auch nicht auf solche, die durch Abbildung 2.3 (rechts) erwartet werden.

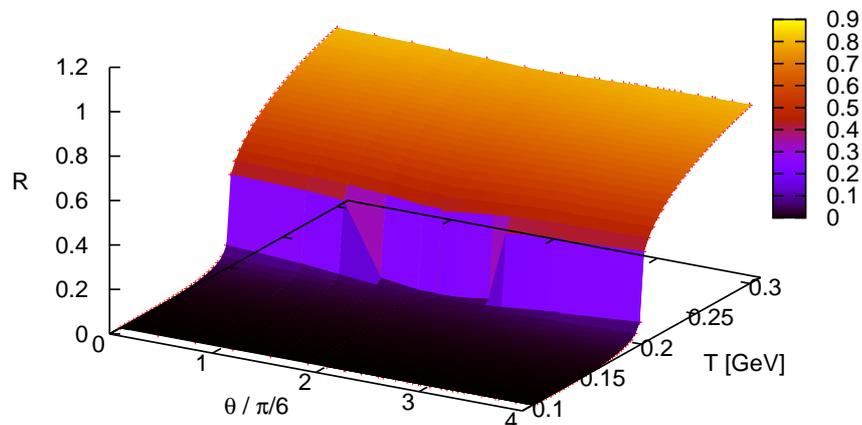


Abbildung 7.8: Betrag des (modifizierten) Polyakovloops $m_0 = 600$ MeV unter Verwendung von \mathcal{U}_3 ($T_0 = 215$ MeV).

7.6 Einfluss des Polyakovlooppotentials \mathcal{U}_3

Die bei Hinzunahme von \mathcal{U}_3 zu verzeichnenden Änderungen im Verhalten der Systemgrößen entsprechen weitgehend denen im $N_f = 2$ -Fall. Jedoch ist hier die Wirkung der zusätzlichen Kopplung von Polyakovloop und chemischen Potential zu sehen. Abbildung 7.8 zeigt eine deutliche Abhängigkeit von θ im hohen Massenbereich, welche im Vergleich zur Verwendung von \mathcal{U}_1 (siehe Abbildung 7.7) deutlich stärker ausgeprägt ist.

8 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio-Modell (PNJL-Modell) bei einem rein imaginären chemischen Potential μ untersucht. Es handelt sich bei diesem um ein effektives Modell zur Beschreibung von Symmetrieeigenschaften der Quantenchromodynamik (QCD). Nach einer Einleitung, in welcher das Modell motiviert wurde, ist im zweiten Kapitel in die Grundlagen von Feldtheorien und QCD eingeführt worden. Hierbei wurde insbesondere auf die im Folgenden interessierenden Symmetrien eingegangen. In einer reinen $SU(N)$ -Eichtheorie ist dies die Zentrumssymmetrie ($Z(N)$ -Symmetrie), in Theorien mit dynamischen Quarks die Roberge-Weiss-Symmetrie (RW-Symmetrie) bei rein imaginärem μ . Bei der QCD lag das Augenmerk des Weiteren auf der chiralen Symmetrie und auf der Farbsymmetrie.

Im dritten Kapitel wurden zwei effektive Theorien für die QCD eingeführt, welche jeweils bestimmte Symmetrieaspekte der QCD reproduzieren. Im Bereich leichter Massen war dies das Nambu-Jona-Lasinio-Modell (NJL-Modell, [29]), welches dazu dient, den chiralen Übergang der QCD zu simulieren. Im Falle unendlich schwerer Quarks hat man die $Z(3)$ -Symmetrie zu erfüllen, welche in einem Übergang erster Ordnung gebrochen wird (Deconfinement). Hierfür werden drei Ansätze für ein Potential \mathcal{U} genannt, mit denen dieser Übergang simuliert werden kann. Die ersten beiden Ansätze \mathcal{U}_1 und \mathcal{U}_2 sind der Literatur entnommen [8,9], als drittes Potential \mathcal{U}_3 wurde eine Erweiterung beider Ansätze angegeben, welche eine Kopplung des Polyakovloops an das chemische Potential für endliche Massen berücksichtigt.

Diese beiden Modelle wurden anschließend im vierten Kapitel zum PNJL-Modell zusammengeführt, um so beide Symmetrien in einem Modell zu kombinieren. Das thermodynamische Potential Ω wurde berechnet und es wurde gezeigt, dass dieses die RW-Symmetrie besitzt. Bedingungen, bei denen Ω reell ist wurden gefunden. Das Potential hängt von verschiedenen Variablen ab, welche über ein Extremalprinzip bestimmt werden können. Im fünften Kapitel wurden numerische Methoden vorgestellt, mit deren Hilfe ein Auswertungsprogramm geschrieben wurde. Desweiteren wurde hier genau spezifiziert, in welchem Umfang das Modell simuliert wurde; die Mesonkondensate und die Quarkzahldichte sind beispielsweise vernachlässigt worden. Außerdem gibt es zwei Möglichkeiten, die auftretenden Integrale zu behandeln: Es können alle (Methode A) oder nur die divergenten (Methode B) regularisiert werden. Letztere reproduziert den korrekten Stefan-Boltzmann-Limes [8].

Im sechsten Kapitel wurden dann die Ergebnisse für zwei Flavours angegeben. Anfangs wurden die Ergebnisse des NJL-Modells und der reinen Eichtheorie reproduziert, um die Simulationsergebnisse mit Literaturwerten vergleichen zu können. Bei den Ergebnissen zum NJL-Modell konnte man einerseits den Einfluss einer zusätzlichen 8-Quark-Wechselwirkung beobachten. Diese verschiebt den chiralen Phasenübergang in Übereinstimmung mit [16] zu niedrigeren Temperaturen. Andererseits erkennt man die Unterschiede zwischen den Regularisierungsmethoden A und B: Methode B verschiebt die mit Methode A beobachteten Übergänge ebenfalls zu niedrigeren Temperaturen. Im

Modell \mathcal{U} der reinen Eichtheorie kann man den Phasentübergang erster Ordnung mittels eines frei wählbaren Parameters T_0 einstellen. Anschließend wurde das PNJL-Modell bei verschwindendem chemischen Potential betrachtet. Um die beobachteten Ergebnisse an niedriger liegende Gitterresultate anzupassen, wurde T_0 verringert (vergleiche [8]). Die Roberge-Weiss-Symmetrie wurde danach durch Variation des chemischen Potentials bzw. dessen Parameter θ bei $m_0 = 5.5$ MeV gezeigt. Für den Polyakovloop ist dieser Übergang erster Ordnung, für das chirale Kondensat zweiter Ordnung, in Übereinstimmung mit [7]. In Letzterem wurde allerdings Regulierungsmethode A angewandt. Die hier verwendete Methode B bewirkt bei Verwendung von \mathcal{U}_2 , dass der RW-Übergang bei höheren Temperaturen als der Deconfinementübergang stattfindet. Durch diesen Umstand und da bei diesem Ansatz auch größere Werte als Eins für den Polyakovloop erlaubt sind, ist \mathcal{U}_2 ungeeignet und es wurde im Folgenden nur mit \mathcal{U}_1 simuliert. Es konnte anschließend gezeigt werden, dass das Phasendiagramm bis auf Unterschiede aufgrund der Parameterwahlen dem in [7] aufgestellten entspricht. Ebenfalls wurde der Endpunkt der RW-Linie mit einem Punkt zweiter Ordnung identifiziert, wie in [20] gezeigt. Die Variation der Quarkmasse zeigte für $m_0 = 0$ MeV qualitativ dasselbe Verhalten wie bei 5.5 MeV, nur dass der chirale Übergang wie zu erwarten zweiter Ordnung ist. Bei 600 MeV schweren Quarks sieht man eine Annäherung an den Grenzfall unendlich schwerer Quarks, die reine Eichtheorie. Die Erweiterung \mathcal{U}_3 des Polyakovlooppotentials bewirkt eine Verschiebung der Übergänge zu niedrigeren Temperaturen, was durch Änderung von T_0 ausgeglichen werden kann. Durch den zusätzlichen linearen Term werden die Übergänge weniger scharf, der Einfluss des in \mathcal{U}_3 enthaltenen Dämpfungsfaktors kann klar beobachtet werden. Unter Variation von θ bewirkt \mathcal{U}_3 keine qualitativen Änderungen zum vorherigen Bild der Phasenstruktur.

In Kapitel Sieben wurden drei Quarkflavours betrachtet. Analog zum $N_f = 2$ -Fall wurden zunächst Ergebnisse für das NJL-Modell und bei verschwindendem chemischen Potential für das volle PNJL-Modell reproduziert. Danach wurde die Phasenstruktur für $N_f = 2+1$ bei imaginärem μ und realistischen Quarkmassen simuliert. Man sieht die RW-Symmetrie und den RW-Übergang bei $\theta = \pi/3$. Erwartungsgemäß zeigt das Kondensat der schweren Quarks einen langsameren Abfall als das zu den leichten Quarks gehörige. Im Weiteren wurden drei Quarks mit derselben Masse betrachtet ($N_f = 3$). Die RW-Symmetrie lässt sich ebenfalls beobachten und die sich ergebende Phasenstruktur ist mit dem $N_f = 2$ -Fall vergleichbar. Auch bei Variation der Massen ist dies so, obgleich man hier qualitative Unterschiede erwarten würde (vergleiche Abbildung 2.3 (rechts)). Es prägt sich hierbei jedoch eine stärkere θ -Abhängigkeit des RW-Übergangs bei hohen Massen aus. Gleiches ergibt sich bei Verwendung von \mathcal{U}_3 , wo die θ -Abhängigkeit nochmals stärker ausgeprägt ist.

Das PNJL-Modell bei imaginärem chemischen Potential liefert also bei zwei und drei Flavour qualitativ dieselbe Phasenstruktur. Aus dieser heraus können, siehe hierzu für den Zweiflavourfall beispielsweise [23], [43] oder [21], nun durch analytische Fortsetzung Vorraussagen für den Bereich realen Potentials gemacht werden oder der Einfluss von den hier vernachlässigten zusätzlichen Kondensaten oder der Quarkzahldichte studiert werden.

A Anhang

A.1 Notation

Alle vorkommenden Größen werden in dieser Arbeit in natürlichen Einheiten angegeben, in welchen $c = \hbar = 1$ gilt. Die Einheit der Energie ist hierbei $1 \text{ eV} = 1.60218\text{e-}19 \text{ J}$. Vierervektoren werden mit x , dreidimensionale Vektoren mit \mathbf{x} angegeben.

Die Pauli-Matrizen sind gemäß

$$\tau_0 = \mathbb{1}, \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

und die Gell-Mann-Matrizen wie folgt definiert

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbb{1}, & \lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_8 &= \sqrt{\frac{1}{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Beide Sätze von Matrizen erfüllen die $SU(N)$ -Algebra (2.4) und sind (bis auf τ_0 und λ_0) spurfrei.

Der metrische Tensor $g_{\mu\nu}$ ist definiert als $g_{00} = 1, g_{ii} = -1$ ($i = 1, \dots, 3$) und 0 sonst. Die γ -Matrizen erfüllen die Dirac-Algebra $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}$ und werden in der Dirac-Darstellung verwendet:

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\tau} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

wobei $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ und $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ ist. Daraus ergeben sich folgende Identitäten für γ - und Pauli-Matrizen:

$$\gamma_\mu \gamma_5 = -\gamma_5 \gamma_\mu \quad (\text{A.4})$$

$$\gamma_5^2 = \mathbb{1} \quad (\text{A.5})$$

$$\boldsymbol{\tau}^2 = \mathbb{1}, \quad \tau_i^2 = \mathbb{1} \quad (\text{A.6})$$

Der adjungierte Quarkspinor ist über $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_0$ definiert.

A.2 Benötigte Formeln

Alle angegebenen Ausdrücke stammen aus [44].

Die Reihenentwicklung der exp-Funktion ist

$$\exp(i\varphi) = \cos \varphi + i \sin \varphi = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \frac{\varphi^{2l}}{(2l)!} + i \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^{2l+1} \frac{\varphi^{2l+1}}{(2l+1)!}. \quad (\text{A.7})$$

Der Arkustangens mit komplexem Argument lässt sich wie folgt auf reelle Funktionen umschreiben:

$$\arctan(a + ib) = \frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(b) + \frac{i}{2} \operatorname{arctanh} \left(\frac{2b}{b^2 + 1} \right), \quad \text{für } a = 0, |b| > 1 \quad (\text{A.8})$$

Eine Darstellung des Kronecker-Deltas ist

$$\delta_{nn'} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \sum_{n', p'} \exp \left\{ i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \mathbf{x} + (\omega_n - \omega_{n'}) \tau \right\}. \quad (\text{A.9})$$

Benötigte Identitäten für die Hyperbolicus-Funktionen:

$$\cosh(-x) = \cosh(x) \quad (\text{A.10})$$

$$\sinh(-x) = -\sinh(x) \quad (\text{A.11})$$

$$\cosh 2x + 1 = 2 \cosh^2 x \quad (\text{A.12})$$

$$\sinh 2x = 2 \sinh x \cosh x \quad (\text{A.13})$$

$$\tanh x = 1 - \frac{2}{e^{2x} + 1} \quad (\text{A.14})$$

A.3 Integrale

Im Folgenden werden die bei der Lösung des Gleichungssystems (4.31) und der Berechnung des thermodynamischen Potentials Ω auftretenden Integrale angegeben.

Ω :

$$I_{01} = \int_0^\Lambda \frac{dp}{\pi^2} p^2 3E(p) \quad I_{02} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} \ln[F(p)] \quad (\text{A.15a})$$

$$K_{01} = \int_0^\Lambda \frac{dp}{\pi^2} p^2 3E_s(p) \quad K_{02} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} \ln[F_s(p)] \quad (\text{A.15b})$$

$\partial_X \Omega$:

$$I_{11} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F^{-1} \partial_R F \quad I_{12} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F^{-1} \partial_\varphi F \quad (\text{A.16a})$$

$$I_{13} = \int_0^\Lambda \frac{dp}{\pi^2} p^2 3 \partial_\sigma E \quad I_{14} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F^{-1} \partial_\sigma F \quad (\text{A.16b})$$

$$K_{11} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F_s^{-1} \partial_R F_s \quad K_{12} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F_s^{-1} \partial_\varphi F_s \quad (\text{A.16c})$$

$$K_{13} = \int_0^\Lambda \frac{dp}{\pi^2} p^2 3 \partial_\sigma E_s \quad K_{14} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F_s^{-1} \partial_\sigma F_s \quad (\text{A.16d})$$

$$K_{15} = \int_0^\Lambda \frac{dp}{\pi^2} p^2 3 \partial_{\sigma_s} E \quad K_{16} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F^{-1} \partial_{\sigma_s} F \quad (\text{A.16e})$$

$$K_{17} = \int_0^\Lambda \frac{dp}{\pi^2} p^2 3 \partial_{\sigma_s} E_s \quad K_{18} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 F_s^{-1} \partial_{\sigma_s} F_s \quad (\text{A.16f})$$

In der Jacobimatrix \mathbf{J} stehen die Ableitungen der Integrale aus $\partial_X \Omega$. Sie setzen sich wie folgt zusammen:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{ij} \sim & \int_0^\infty \frac{dp}{\pi^2} p^2 (F_k^{-1} \partial_{X_i} \partial_{X_j} F_k - F_k^{-2} (\partial_{X_i} F_k) (\partial_{X_j} F_k)) \\ & + \int_0^\Lambda \frac{dp}{\pi^2} 3 p^2 \partial_{X_i} \partial_{X_j} E_k(p) \quad (k = u, s). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

A.4 Konvergenz der Integrale

Betrachte im Folgenden $N_f = 2$ und nur σ als Kondensat. Es wird die Konvergenz der Integrale aus (4.31) in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen N betrachtet, indem sie mit denen von Mathematica gelieferten Werten verglichen werden.

Durch eine Veränderung der Genauigkeit im ursprünglichen Berechnungsalgorithmus [41] der Legendre- und Laguerre-Polynome von $1e-14$ in $1e-12$ ist es möglich, N zu variieren. Ansonsten funktioniert der Algorithmus nur bis $N = 62$.

Die endlichen Integrale konvergieren sehr schnell gegen den Mathematicawert, daher sind sie hier ausgelassen. Betrachte nun $\varphi = 1$, da in diesem Fall alle Integrale ungleich Null sind. Für die übrigen Parameter werden typische Werte eingesetzt.

Einige Ergebnisse sind in Abbildung A.1 und A.2 dargestellt. Der Vergleich ergibt wie erwartet für kleine N extrem unterschiedliche Ergebnisse. Erst ab $N > 80$ sind die Werte innerhalb einer fünfprozentigen Abweichung. Für $N > 200$ ist diese verschwindend gering ($< 0.1\%$) bis auf für die beiden σ -Ableitungen I14 und I29. Diese weichen bis zu 0.5% ab. Für $N > 300$ wird diese Abweichung nochmals halbiert. Das zuvor mögliche $N = 62$ ist vor allem für kleine Werte von T, R und σ völlig unzureichend. Hier gibt es teilweise Abweichungen von über 10% . Ein Wert von $N > 200$ liefert also weit verbesserte Ergebnisse.

A.5 Chirale Kondensate bei $T = 0$

Zur Normierung der chiralen Kondensate wird deren Wert bei $T = 0$ verwendet. Diese Werte werden im Folgenden angeben.

| m_0 [Mev] | σ_0 [GeV] ³ | |
|-------------|-------------------------------|-----------------|
| | $G_{s8} = 0$ | $G_{s8} \neq 0$ |
| 0.0 | -2.943833e-02 | -2.909743e-02 |
| 5.5 | -3.023439e-02 | -3.022610e-02 |
| 600.0 | -4.682187e-02 | -4.725690e-02 |

Tabelle A.1: Werte des chiralen Kondensats für $T = 0$ bei $N_f = 2$ für verschiedene Quarkmassen und Wechselwirkungen.

| m_0 [Mev] | m_s [Mev] | σ_0 [GeV] ³ | σ_{s0} [GeV] ³ |
|-------------|-------------|-------------------------------|----------------------------------|
| 0.0 | 0.0 | -1.330948e-02 | -1.330948e-02 |
| 0.0 | 5.5 | -1.343081e-02 | -1.378713e-02 |
| 0.0 | 50.0 | -1.405562e-02 | -1.638184e-02 |
| 0.0 | 135.7 | -1.463032e-02 | -1.898690e-02 |
| 0.0 | 600.0 | -1.547481e-02 | -2.325605e-02 |
| 5.5 | 0.0 | -1.389310e-02 | -1.354616e-02 |
| 5.5 | 5.5 | -1.399438e-02 | -1.399438e-02 |
| 5.5 | 50.0 | -1.453266e-02 | -1.648419e-02 |
| 5.5 | 137.5 | -1.504442e-02 | -1.903518e-02 |
| 5.5 | 600.0 | -1.581434e-02 | -2.326356e-02 |
| 50.0 | 0.0 | -1.672872e-02 | -1.465368e-02 |
| 50.0 | 5.5 | -1.677274e-02 | -1.499200e-02 |
| 50.0 | 50.0 | -1.703232e-02 | -1.703232e-02 |
| 50.0 | 137.5 | -1.731053e-02 | -1.931043e-02 |
| 50.0 | 600.0 | -1.777049e-02 | -2.330913e-02 |
| 137.5 | 0.0 | -1.931628e-02 | -1.559697e-02 |
| 137.5 | 5.5 | -1.933609e-02 | -1.586588e-02 |
| 137.5 | 50.0 | -1.945998e-02 | -1.757250e-02 |
| 137.5 | 137.5 | -1.960339e-02 | -1.960339e-02 |
| 137.5 | 600.0 | -1.985763e-02 | -2.336179e-02 |
| 600.0 | 0.0 | -2.336270e-02 | -1.693788e-02 |
| 600.0 | 5.5 | -2.336572e-02 | -1.713214e-02 |
| 600.0 | 50.0 | -2.338576e-02 | -1.843307e-02 |
| 600.0 | 137.5 | -2.341118e-02 | -2.010658e-02 |
| 600.0 | 600.0 | -2.346089e-02 | -2.346089e-02 |

Tabelle A.2: Werte der chiralen Kondensate für $T = 0$ bei $N_f = 3$ für verschiedene Quarkmassen.

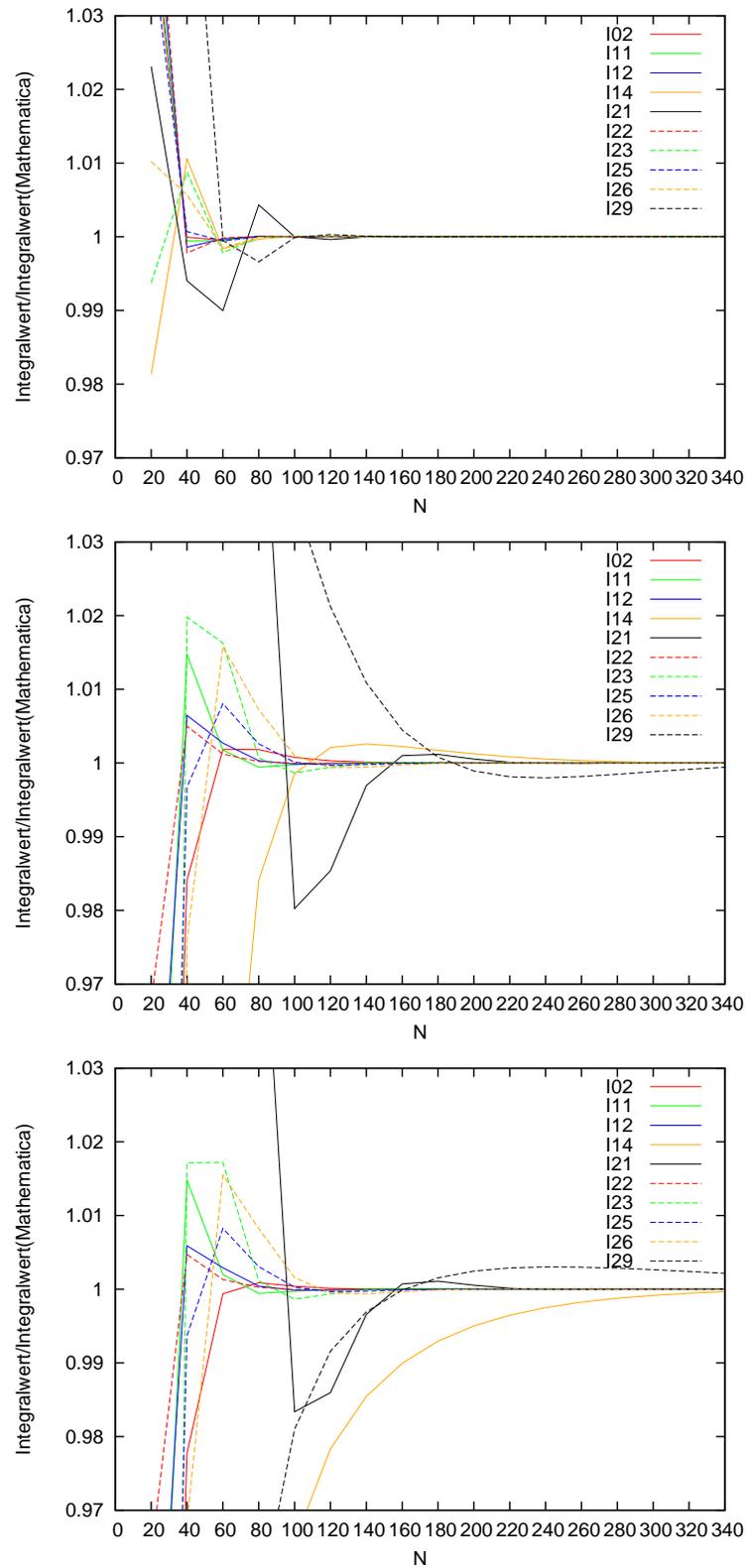


Abbildung A.1: $T = 0.1$, $R = 0.2$, $\sigma = 0.02, 0.002$ und 0.0002 .

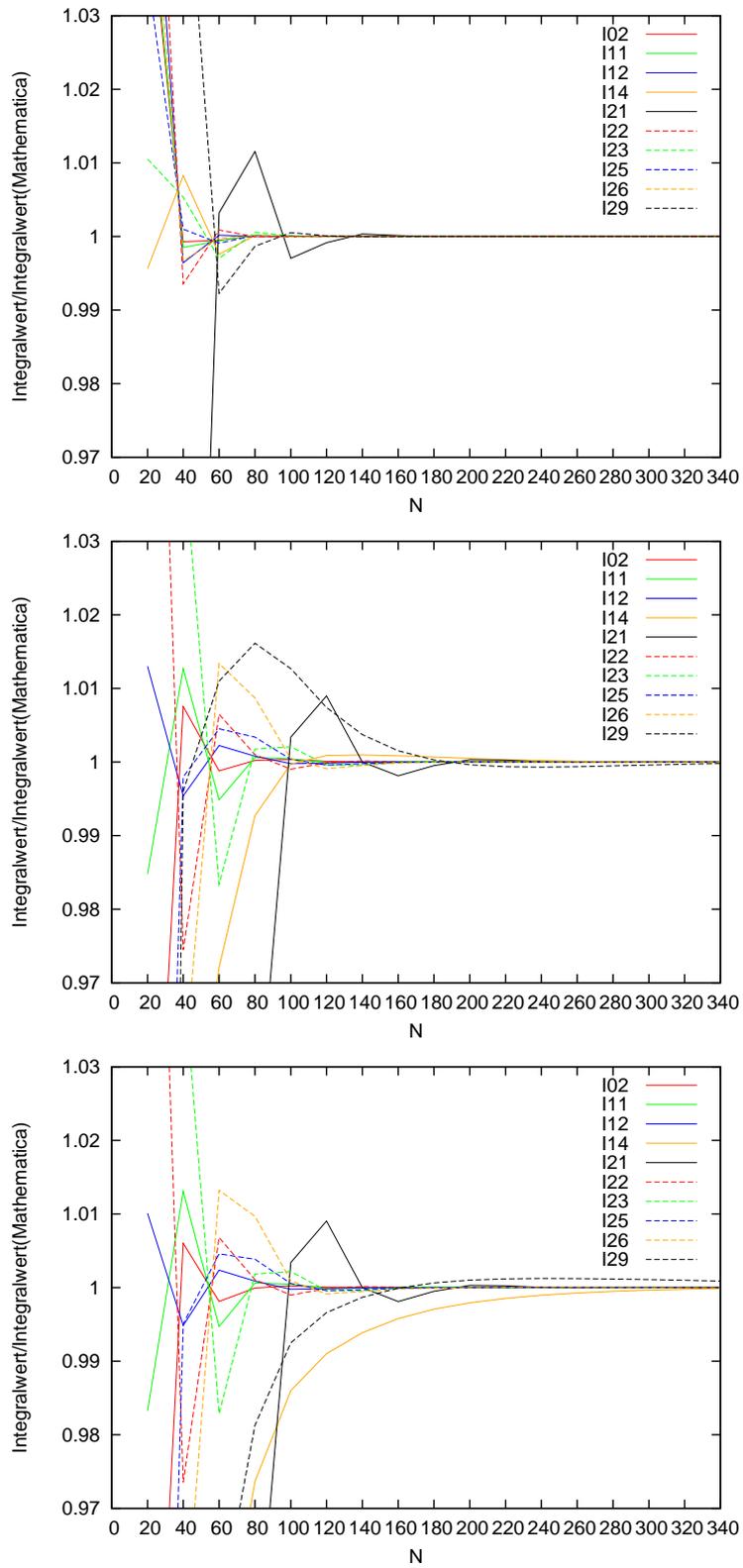


Abbildung A.2: $T = 0.1$, $R = 0.8$, $\sigma = 0.02, 0.002$ und 0.0002 .

Literaturverzeichnis

- [1] PHILIPSEN, O.: *Status of Lattice Studies of the QCD Phase Diagram*. Prog. Theor. Phys. Suppl., 174:206–213, 2008.
- [2] PHILIPSEN, O.: *Exploring the QCD phase diagram*. PoS, CPOD07:028, 2007.
- [3] SATZ, H.: *The Thermodynamics of Quarks and Gluons*. Lect. Notes Phys., 785:1–21, 2010.
- [4] DUMITRU, A., R. D. PISARSKI und D. ZSCHIESCHE: *Dense quarks, and the fermion sign problem, in a $SU(N)$ matrix model*. Phys. Rev., D72:065008, 2005.
- [5] ROBERGE, A. und N. WEISS: *Gauge Theories with imaginary chemical potential and the phases of QCD*. Nucl. Phys., B275:734, 1986.
- [6] FUKUSHIMA, K.: *Chiral effective model with the Polyakov loop*. Phys. Lett., B591:277–284, 2004.
- [7] SAKAI, Y., K. KASHIWA, H. KOUNO und M. YAHIRO: *Phase diagram in the imaginary chemical potential region and extended Z_3 symmetry*. Phys. Rev., D78:036001, 2008.
- [8] RATTI, C., M. A. THALER und W. WEISE: *Phase diagram and thermodynamics of the PNJL model*. 2006.
- [9] RATTI, C., S. ROESSNER, M. A. THALER und W. WEISE: *Thermodynamics of the PNJL model*. Eur. Phys. J., C49:213–217, 2007.
- [10] RATTI, C., M. A. THALER und W. WEISE: *Phases of QCD: Lattice thermodynamics versus PNJL model*. AIP Conf. Proc., 842:104–106, 2006.
- [11] ROESSNER, S., C. RATTI und W. WEISE: *Polyakov loop, diquarks and the two-flavour phase diagram*. Phys. Rev., D75:034007, 2007.
- [12] RATTI, C., S. ROESSNER und W. WEISE: *Quark number susceptibilities: Lattice QCD versus PNJL model*. Phys. Lett., B649:57–60, 2007.
- [13] ROESSNER, S., T. HELL, C. RATTI und W. WEISE: *The chiral and deconfinement crossover transitions: PNJL model beyond mean field*. Nucl. Phys., A814:118–143, 2008.
- [14] WEISE, W.: *Symmetries and symmetry breaking patterns in QCD: chiral and deconfinement transitions*. 2009.
- [15] CRISTOFORETTI, M., T. HELL und W. WEISE: *Monte-Carlo simulations of QCD Thermodynamics in the PNJL model*. J. Phys. Conf. Ser., 168:012021, 2009.

- [16] KASHIWA, K., H. KOUNO, T. SAKAGUCHI, M. MATSUZAKI und M. YAHIRO: *Chiral phase transition in an extended NJL model with higher-order multi-quark interactions*. Phys. Lett., B647:446–451, 2007.
- [17] KASHIWA, K., H. KOUNO, M. MATSUZAKI und M. YAHIRO: *Critical endpoint in the Polyakov-loop extended NJL model*. Phys. Lett., B662:26–32, 2008.
- [18] KASHIWA, K., M. MATSUZAKI, H. KOUNO, Y. SAKAI und M. YAHIRO: *Meson mass at real and imaginary chemical potentials*. Phys. Rev., D79:076008, 2009.
- [19] KASHIWA, K., H. KOUNO und M. YAHIRO: *Dual quark condensate in the Polyakov-loop extended NJL model*. Phys. Rev., D80:117901, 2009.
- [20] KOUNO, H., Y. SAKAI, K. KASHIWA und M. YAHIRO: *Roberge-Weiss phase transition and its endpoint*. J. Phys., G36:115010, 2009.
- [21] SAKAI, Y., K. KASHIWA, H. KOUNO, M. MATSUZAKI und M. YAHIRO: *Vector-type four-quark interaction and its impact on QCD phase structure*. Phys. Rev., D78:076007, 2008.
- [22] SAKAI, Y., K. KASHIWA, H. KOUNO und M. YAHIRO: *Polyakov loop extended NJL model with imaginary chemical potential*. Phys. Rev., D77:051901, 2008.
- [23] SAKAI, Y., K. KASHIWA, H. KOUNO, M. MATSUZAKI und M. YAHIRO: *Determination of QCD phase diagram from the imaginary chemical potential region*. 2009.
- [24] SAKAI, Y., H. KOUNO und M. YAHIRO: *QCD phase diagram at imaginary baryon and isospin chemical potentials*. 2009.
- [25] FU, W.-J., Z. ZHANG und Y.-X. LIU: *2+1 Flavor Polyakov–Nambu–Jona-Lasinio Model at Finite Temperature and Nonzero Chemical Potential*. Phys. Rev., D77:014006, 2008.
- [26] TSAI, H.-M. und B. MULLER: *Phenomenology of the three-flavour PNJL model and thermal strange quark production*. J. Phys., G36:075101, 2009.
- [27] FUKUSHIMA, K.: *Phase diagrams in the three-flavor Nambu–Jona-Lasinio model with the Polyakov loop*. Phys. Rev., D77:114028, 2008.
- [28] FUKUSHIMA, K.: *Isentropic thermodynamics in the PNJL model*. Phys. Rev., D79:074015, 2009.
- [29] NAMBU, Y. und G. JONA-LASINIO: *Dynamical model of elementary particles based on an analogy with superconductivity. I*. Phys. Rev., 122:345–358, 1961.
- [30] KAPUSTA, J. I. und C. GALE: *Finite-Temperature Field Theory. Principles and Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, New York, 2. Auflage, 2006.
- [31] KUGO, T.: *Eichtheorie*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1997.
- [32] FEYNMAN, R. P. und A. R. HIBBS: *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.

- [33] 'T HOOFT, G.: *How Instantons solve the $U(1)$ Problem*. Phys. Rept., 142:357–387, 1986.
- [34] YANG, C.-N. und R. L. MILLS: *Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance*. Phys. Rev., 96:191–195, 1954.
- [35] LOTTINI, S.: *Gittersimulation einer effektiven Polyakovloopwirkung*. 2009.
- [36] LANGELAGE, J. und O. PHILIPSEN: *The deconfinement transition of finite density QCD with heavy quarks from strong coupling series*. 2009.
- [37] PISARSKI, R. D. und F. WILCZEK: *Remarks on the Chiral Phase Transition in Chromodynamics*. Phys. Rev., D29:338–341, 1984.
- [38] KLEVANSKY, S. P.: *The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics*. Rev. Mod. Phys., 64:649–708, 1992.
- [39] HATSUDA, T. und T. KUNIHIRO: *QCD phenomenology based on a chiral effective Lagrangian*. Phys. Rept., 247:221–367, 1994.
- [40] HOLLAND, K. und U.-J. WIESE: *The center symmetry and its spontaneous breakdown at high temperatures*. 2000.
- [41] TEUKOLSKY, W. H., S. A. VETTERLING, W. T. PRESS und B. P. FLANNERY: *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge, 3. Auflage Auflage, 2007.
- [42] D'ELIA, M. und F. SANFILIPPO: *The order of the Roberge-Weiss endpoint (finite size transition) in QCD*. Phys. Rev., D80:111501, 2009.
- [43] ABUKI, H. et al.: *Electrical neutrality and pion modes in the two flavor PNJL model*. Phys. Rev., D78:014002, 2008.
- [44] BRONSTEIN, I. N., K.A. SEMENDJAJEW, G. MUSIOL und H. MÜHLIG: *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, 5. Auflage 2001.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich gerne bei allen Leuten herzlich bedanken, die mir während meines Studiums und bei der Erstellung dieser Arbeit hilfreich zur Seite gestanden haben und ohne die dies sicherlich nicht möglich gewesen wäre. Besonders bedanken möchte ich mich bei:

- Prof. Dr. Owe Philipsen für die viele Unterstützung bei der Erstellung dieser Arbeit und dafür, stets eine offene Tür vorgefunden zu haben.
- Lars Zeidlewicz und Dr. Claudia Ratti als unkomplizierte Ansprechpartner bezüglich Programmierfragen.
- Janine Hütig und Lars Zeidlewicz für das Korrekturlesen dieser Arbeit.
- Linus Feldkamp, Dr. Jens Langelage, Christian Schäfer und Dr. Marcus Tassler, mit denen bei uns im Büro stets eine angenehme und produktive Arbeitsatmosphäre herrschte.
- Der gesamten Arbeitsgruppe Philipsen für die wirklich ausgezeichnete Atmosphäre innerhalb der Gruppe und den vielen produktiven Diskussionen.
- Meinen Kommilitonen und hier besonders bei Denis Anielski, Bastian Drees, Jan Hermes und Michael Rath für gemeinsames Arbeiten und die schöne Studienzeit.
- Meinen Mitbewohnern im Deutschen Studentenheim, insbesondere Michael Eismann, Thomas Höing und Andreas Schmidt, für freundschaftliches Zusammenleben und die inspirierende Zeit.
- Meinen Eltern Erhard und Maria Pinke sowie meinem Bruder Alexander, die mich immer und überall bedingungslos unterstützt haben.
- Meiner Freundin Stephanie Merker für den großartigen Rückhalt und die Unterstützung in allen Dingen.

Selbstständigkeitserklärung

Ich versichere hiermit, dass ich diese Arbeit selbständig und nur unter Benutzung der angegebenen Mittel erstellt habe.

Christopher Pinke
Münster, 6. März 2010