

Diplomarbeit

Gitterregularisierte QCD mit chiral verdrehem Massenterm bei endlichen Temperaturen

vorgelegt von
Lars Zeidlewicz

10. Januar 2008

Betreuer: Professor Dr. O. Philipsen

Gegenüber der am 10. Januar 2008 im Prüfungsamt abgegebenen Diplomarbeit wurde in der hier vorliegenden Version lediglich eine Formulierung in Abschnitt 2.4.2 abgeändert.
Münster, 05. März 2008

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
2. Quantenchromodynamik im Kontinuum	7
2.1. Entwicklung des Standardmodells	7
2.2. Lagrangedichte der Quantenchromodynamik	8
2.3. Thermische Feldtheorie	9
2.4. Perturbativer Zugang	11
2.4.1. Schwachkopplungsentwicklung	11
2.4.2. Eichfixierung und Geisfelder	12
3. Gitterformulierung der Quantenchromodynamik	15
3.1. Diskretisierte Eichfeld- und Fermionwirkungen	15
3.1.1. Eichfelder	15
3.1.2. Wilson-Fermionen	16
3.2. Chirale Symmetriebrechung und Aoki-Phase	17
3.3. Störungstheorie auf dem Gitter	18
4. Twisted Mass QCD	21
4.1. Formulierung der tmQCD	21
4.1.1. Der freie Propagator	23
4.1.2. Symmetrien der tmQCD	23
4.2. Maximaler Twist	24
4.2.1. Automatische Verbesserung	24
4.2.2. Kritische Masse	25
4.3. Phasenstruktur bei $T = 0$	26
5. Numerische Simulationen	29
5.1. HMC-Algorithmus	29
5.2. Analyse von Monte-Carlo Daten	30
5.2.1. Monte-Carlo-Simulation und Markov-Prozesse	30
5.2.2. Jackknife-Binning	31
5.3. Observable	32
5.3.1. Plakette und Polyakov-Loop	32
5.3.2. Pionnorm	33
6. Eigenschaften der tmQCD bei schwacher Kopplung	35
6.1. Freier Propagator	35
6.1.1. Dispersionsrelation	36

6.2.	Stefan-Boltzmann-Grenzwert	39
6.2.1.	Freies Gas aus Quarks und Gluonen im Kontinuum	39
6.2.2.	Freies Gas aus Quarks und Gluonen auf dem Gitter	41
6.2.3.	Masselose Teilchen im SB-Grenzwert	43
6.2.4.	Massive Teilchen im SB-Grenzwert	44
6.3.	Korrektur zum Druck in erster Ordnung	49
6.3.1.	Störungstheorie für gitterregularisierte tmQCD	49
6.3.2.	Kontinuumsimes für die erste fermionische Druckkorrektur	51
7.	Phasenstruktur der tmQCD bei endlicher Temperatur	53
7.1.	Thermischer Phasenübergang der QCD auf dem Gitter	53
7.1.1.	Klassifikation von Phasenübergängen	53
7.1.2.	Massenabhängigkeit des thermischen Übergangs	55
7.2.	Mögliche Phasenstruktur	56
7.2.1.	Modell eines effektiven Potentials	58
7.3.	Simulationsergebnisse	61
7.3.1.	Thermische Übergangslinie bei $\mu = 0.005$	61
7.3.2.	Thermischer Übergang in der (κ, μ) -Ebene	65
8.	Zusammenfassung und Ausblick	69
A.	Anhang	71
A.1.	Verwendete Konventionen und Abkürzungen	71
A.1.1.	Einheitensystem	71
A.1.2.	Euklidische Raumzeit	71
A.1.3.	Summenkonvention	71
A.1.4.	Integration bei endlichen Temperaturen	71
A.1.5.	Impulsintegration auf einem räumlich unendlichen Gitter	72
A.1.6.	Gitterimpulse	72
A.2.	Übersicht über die Simulationen	72
A.2.1.	Simulationen zu Abschnitt 7.3.1	72
A.2.2.	Simulationen zu Abschnitt 7.3.2	73
	Literaturverzeichnis	75

1. Einleitung

Das von der Temperatur und dem chemischen Potential aufgespannte Phasendiagramm der Quantenchromodynamik (QCD) – vgl. Abbildung 1.1 – ist in den letzten Jahren verstärkt untersucht worden (vgl. [1, 2]). Während im Bereich großen chemischen Potentials, d. h. großer Dichten, exotische Materiezustände im Zusammenhang mit der sogenannten Farbsupraleitung erwartet werden, spiegelt der Bereich nahe der Achse verschwindenden chemischen Potentials die Evolution des sich abkühlenden Universums wider. Dies ist auch der Bereich, der durch die Beschleunigerexperimente RHIC und LHC zugänglich wird.

Bei tiefen Temperaturen gibt es keine freien Farbladungen und die Materie liegt in ihrem hadronischen Zustand vor. Bei höheren Temperaturen wird aufgrund der asymptotischen Freiheit die QCD-Kopplung immer schwächer, bis die dynamischen Freiheitsgrade schließlich durch schwach wechselwirkende Quarks und Gluonen gegeben sind. Ob es zwischen der hadronischen Phase und diesem Quark-Gluon-Plasma einen echten Phasenübergang gibt oder ein kontinuierlicher Übergang – ein sogenannter *crossover* – vorliegt, ist zunächst nicht klar und kann je nach chemischem Potential unterschiedlich sein (vgl. [3]).

Die Achse verschwindenden chemischen Potentials ist durch Simulationen der auf einem Raumzeitgitter diskretisierten QCD zugänglich (vgl. [2, 5]). Aktuelle Ergebnisse [6, 7] zeigen, dass für verschwindendes chemisches Potential das kontinuierliche Übergangsverhalten realisiert ist und dass sich dieser Übergang bei etwa 175 MeV lokalisieren lässt. Die Übergangsregion erstreckt sich über einen Bereich von etwa 40 MeV. Diese Zahlen stützen sich dabei auf Simulationen, bei denen zur Diskretisierung des Quarksektors die sogenannten *staggered* Fermionen (vgl. z. B. [8]) verwendet wurden. Untersuchungen mit anderen Fermiondiskretisierungen, insbesondere der Wilson'schen mit der Verbesserung durch den sogenannten Sheikholeslami-Wohlert Term, liefern ähnliche Werte für die Übergangstemperatur, sind aber insgesamt noch nicht so weit fortgeschritten [9, 10, 11]. Dies lässt es wünschenswert erscheinen, die Vorhersagen mit *staggered* Fermionen durch die Verwendung weiterer Formulierungen zu ergänzen und abzusichern. Auch angesichts des anhaltenden Disputs über die grundsätzliche Verwendbarkeit der *staggered* Fermionen unter Benutzung des sogenannten *rooting*-Verfahrens [12, 13] ist eine solche alternative Behandlung sicherlich geraten.

Die unverbesserten Wilson-Fermionen leiden unter Diskretisierungsartefakten schon in der ersten Ordnung des Gitterabstandes. Seit 1999 gibt es eine Variante dieser Fermionformulierung, die es erlaubt, solche Gittereffekte durch einen modifizierten Massenterm zu vermeiden. Dabei handelt es sich um die sogenannte *twisted mass QCD* (tmQCD; vgl. [14]), die ihren Namen der chiralen verdrehten Masse schuldet. Im Bereich verschwindender Temperaturen ist die tmQCD gut untersucht und findet für aktuelle Projekte Verwendung [15]. Die ersten anfänglichen Untersuchungen für nichtverschwindende Temperaturen stammen allerdings erst aus dem Jahr 2006 [16].

Bevor physikalische Fragestellungen in Bezug auf den thermischen Übergang der QCD

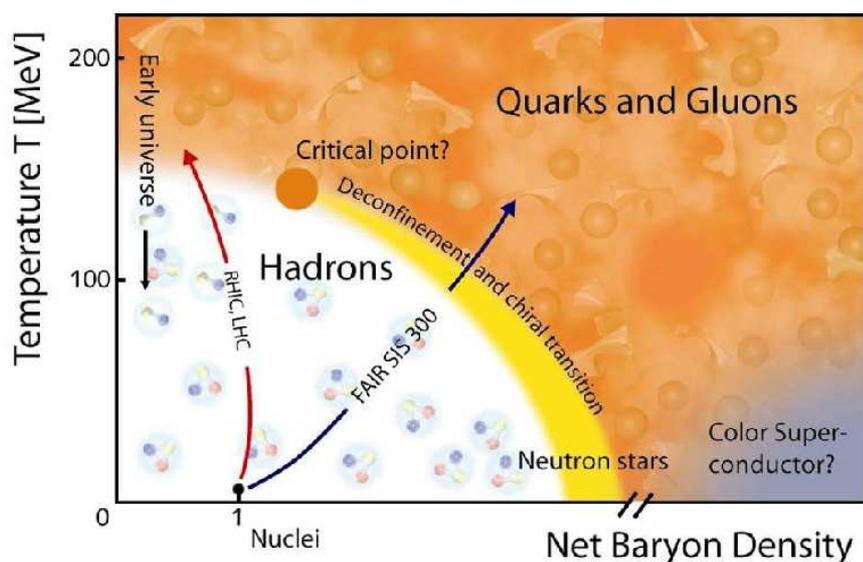


Abbildung 1.1: Schematisches Phasendiagramm der QCD; Quelle: [4]

mit der neuen Formulierung angegangen werden können, muss die von Gitterartefakten durchsetzte Phasenstruktur dieser Formulierung hinreichend verstanden sein. Außerdem sollte man auch eine Vorstellung von der Größe der Gittereffekte im Vergleich zu anderen Fermiondiskretisierungen haben. Denn obwohl die erste Ordnung im Gitterabstand für geeignet gewählte Parameter automatisch verbessert ist, können natürlich die nachfolgenden Ordnungen das Verhalten beeinträchtigen. Diese Arbeit soll deshalb einen Beitrag zur Untersuchung der tmQCD bei endlichen Temperaturen erbringen. Ein Teil der Ergebnisse wurde bereits in [17] veröffentlicht.

In den nächsten beiden Kapiteln werden einige Grundlagen zusammengestellt, auf denen das Weitere basiert. Kapitel 2 behandelt dabei die Kontinuums-QCD, während in Kapitel 3 die Gitterregularisierung in der Wilson'schen Formulierung vorgestellt wird. In Kapitel 4 wird dann die tmQCD für zwei entartete Fermionenarten eingeführt. Dabei werden insbesondere die automatische Verbesserung und die Phasenstruktur bei verschwindender Temperatur diskutiert. In Kapitel 5 werden die wesentlichen numerischen Methoden für die durchgeführten Simulationen und die verwendeten Observablen zusammengetragen.

Kapitel 6 ist dem Schwachkopplungsregime gewidmet. Durch die Untersuchung des Drucks in diesem Bereich, für den exakte Kontinuumsergebnisse existieren, lassen sich die Gittereffekte quantifizieren. In Kapitel 7 werden dann die aus den Simulationen der vollen QCD erhaltenen Daten benutzt, um Aussagen über die Phasenstruktur der tmQCD bei nichtverschwindender Temperatur zu machen.

Nach der Zusammenfassung in Kapitel 8 sind im Anhang die verwendeten Abkürzungen und Konventionen gesammelt. Außerdem ist eine Übersicht über die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen angehängt.

2. Quantenchromodynamik im Kontinuum

In diesem Kapitel werden einige wesentliche Grundlagen zusammengefasst. Nach einem kurzen historischen Überblick im folgenden Abschnitt werden im Weiteren die für diese Arbeit wichtigen Aspekte der Kontinuumsformulierung der QCD behandelt. Dabei geht es zum einen um die Berechnung thermischer Gleichgewichtserwartungswerte mithilfe euklidischer Funktionalintegrale. Zum anderen wird der störungstheoretische Zugang mittels der Schwachkopplungsentwicklung kurz vorgestellt.

2.1. Entwicklung des Standardmodells

Seit seiner Entstehung in den 60er und 70er Jahren des 20. Jahrhunderts hat sich das heute sogenannte Standardmodell der Elementarteilchen als grundlegende Theorie zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen den elementaren Teilchen, d. h. denjenigen Teilchen, für die es bislang keine experimentellen Anzeichen einer Substruktur gibt, etabliert. Damals postulierten Gell-Mann [18] und Zweig [19] die Quarks als die Konstituenten der Hadronen; dabei bildete der sogenannte Achtfache Weg, also die Einordnung der Hadronen in $SU(3)$ Multipletts, durch Gell-Mann und Ne'eman die Basis (vgl. hierzu die Referenzen 1 bis 3 in [18]).

Die Beschreibung der Wechselwirkungen im Standardmodell erfolgt durch Quantenfeldtheorien [20, 21], deren Prototyp die Quantenelektrodynamik (QED) ist, die schon in den 1940er Jahren formuliert wurde. Wichtige Beiträge kamen hierbei insbesondere von Schwinger, Tomonaga und Feynman (vgl. [22]). Ein bedeutender weiterer Schritt war die Formulierung der Yang-Mills Theorie [23], da sie als nichtabelsche Eichtheorie asymptotische Freiheit besitzt, wie von Gross und Wilczek [24] sowie Politzer [25] gezeigt wurde. Die asymptotische Freiheit ist eine wesentliche Voraussetzung für das Confinement, d. h. die Beobachtung, dass freie Quarks nicht existieren.

Die einzige Ausnahme unter den bekannten fundamentalen Wechselwirkungen bildet die Gravitation, die sich bisher nicht erfolgreich als Quantentheorie hat formulieren lassen. Auf den für die aktuelle Teilchenphysik relevanten Energie- bzw. Längenskalen, die natürlich durch die vorhandenen experimentellen Möglichkeiten bestimmt sind – beim LHC am CERN sollen bis zu 14 TeV erreicht werden (vgl. [26]) – spielt die Gravitation bisher keine Rolle. Die verbleibenden Kräfte, d. h. die starke und die schwache Kraft sowie der Elektromagnetismus, werden im Rahmen des Standardmodells erfolgreich beschrieben. Ein herausragender Erfolg war hierbei die Vereinigung der schwachen Kraft mit der Quantenelektrodynamik zur elektroschwachen Theorie (vgl. [27, 28]).

Die physikalischen Freiheitsgrade einer Quantenfeldtheorie sind durch Felder auf der kontinuierlichen Raumzeit gegeben, die entweder – im ursprünglichen Operatorformalismus – als Operatoren auf einem Zustandsraum definiert sind oder aber im Funktionalintegral als Integrationsvariablen auftreten. Beide Formalismen sind gleichermaßen gültig;

jedoch bietet die Funktionalintegralmethode, die auf Dirac und Feynman zurückgeht,¹ für viele Anwendungen Vorteile, weshalb die weitere Betrachtung auf diesen Zugang beschränkt bleibt.

2.2. Lagrangedichte der Quantenchromodynamik

Der die Wechselwirkung zwischen den Konstituenten hadronischer Materie, also den Quarks und den Gluonen als zugehörigen Austauschbosonen, beschreibende Teil des Standardmodells ist die Quantenchromodynamik (QCD) [21]. Die Farbe ist dabei eine zunächst zur Erhaltung des Pauli-Prinzips ad hoc eingeführte zusätzliche Quantenzahl der Quarks. In der QCD wird sie dadurch zum dynamischen Prinzip erhoben, dass für die Lagrangedichte lokale Eichinvarianz unter $SU(3)_F$ -Transformationen im Farbraum gefordert wird. Somit ergibt sich die folgende Lagrangedichte für die QCD:²

$$\mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}) = \bar{\psi}(x) (i\gamma_\mu D^\mu - m) \psi(x) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^r F^{\mu\nu r} \quad (2.1)$$

Dabei beschreiben die fermionischen Felder $\psi(x) = (\psi_{\alpha,c,f}(x))$ die Quarks. Der Index f unterscheidet die verschiedenen Quarkarten (*up*, *down*, ...), die auch als *flavour* bezeichnet werden. Ferner tragen die Fermionfelder einen Farbindex $c = 1, 2, 3$ sowie einen Spinorindex α . Als Spinoren transformieren die Fermionfelder nichttrivial unter der Lorentzgruppe. Zusammen mit den Dirac'schen γ -Matrizen ist die so definierte Lagrangedichte der einzige renormierbare skalare Ausdruck, der sich für Spin-1/2-Teilchen bilden lässt.

Die kovariante Ableitung $D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu^r(x)T^r$ stellt die lokale Invarianz unter $SU(3)_F$ -Transformationen sicher. Durch diesen Term sind die Fermionen an die Eichfelder $A_\mu^r(x)$ gekoppelt. Die Matrizen T^r sind die acht Generatoren der $SU(3)$:

$$[T^r, T^s] = if_{rst}T^t \quad (2.2)$$

Es gilt die Normierung $\text{Sp} T^r T^s = \frac{1}{2} \delta^{rs}$. Der Feldstärketensor $F_{\mu\nu} = -igF_{\mu\nu}^r T^r$ ist definiert über die folgende Beziehung:

$$-igF_{\mu\nu} = [D_\mu, D_\nu] \quad (2.3)$$

Der in den Feldstärken quadratische Yang-Mills-Teil der Lagrangedichte gibt den dynamischen Teil des reinen Eichsektors an. Da die $SU(3)$ eine nichtabelsche Gruppe ist, tauchen auch in den Eichfeldern kubische und quartische Selbstwechselwirkungsterme auf.

Für die spätere Übertragung auf die gitterregularisierte Theorie sei noch angemerkt, dass sich die kovariante Ableitung in Verbindung zu einem infinitesimalen Paralleltransport setzen lässt. Dazu bedenkt man, dass die normale Ableitung als Grenzfall einer endlichen Differenz aufgrund der ortsabhängigen $SU(3)$ -„Phase“ nicht mehr sinnvoll

¹Feynman beruft sich bei seiner Formulierung von Pfadintegralen für die Quantenmechanik [29] auf Diracs Arbeiten.

²In dieser Arbeit werden „natürliche Einheiten“ mit $\hbar = c = k_B = 1$ verwendet.

definiert ist. Man benötigt also ähnlich wie auf einer gekrümmten Fläche einen Paralleltransport $P(x, \varepsilon n_\mu)$ zwischen den beiden Punkten x und $x + \varepsilon n_\mu$.

$$\begin{aligned} & \psi(x + \varepsilon n_\mu) - P(x, \varepsilon n_\mu)\psi(x) \\ &= \psi(x + \varepsilon n_\mu) - \psi(x) - \delta\psi(x, \varepsilon n_\mu) \\ &\rightarrow \partial_\mu\psi(x) - \delta\psi(x, \varepsilon n_\mu) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Mit $\delta\psi = \varepsilon ig A_\mu^r T^r \psi$ erhält man die kovariante Ableitung. Den infinitesimalen Paralleltransport $P(x, \varepsilon n_\mu) = 1 + ig A_\mu^r T^r$ kann man dann auf endliche Abstände verallgemeinern; hier wird im Hinblick auf die spätere Verwendung in Kapitel 3 das Ergebnis für eine gerade Linie der Länge a angegeben, auf der die Eichfelder als konstant angenommen werden:

$$P(x, an_\mu) = e^{iag A_\mu^r T^r} \quad (2.5)$$

2.3. Thermische Feldtheorie

Bei der Beschreibung von Vielteilchensystemen ist man an kollektiven Eigenschaften wie der Temperatur oder dem Druck interessiert. Dies ist z. B. der Fall für das sogenannte Quark-Gluon-Plasma, das im frühen Universum vorgelegen haben muss. Der Übergang vom Quark-Gluon-Plasma zur hadronischen Phase bei etwa 175 MeV liegt im Bereich der aktuellen Beschleuniger, sodass es neben kosmologischen Beobachtungen auch Experimente gibt bzw. in absehbarer Zeit geben wird, die sich mit den theoretischen Vorhersagen in Verbindung setzen lassen sollten.

Die Statistische Physik [30] bietet einen Rahmen zur Beschreibung von Vielteilchensystemen, der zunächst von der zu Grunde liegenden Wechselwirkungstheorie unabhängig ist. Im großkanonischen Ensemble werden die Temperatur T , das Volumen V und das chemische Potential μ festgehalten. Die zentrale Größe ist dann die Zustandssumme Z :

$$Z(T, V, \mu) = \text{Sp} e^{-\beta(H - \mu N)} \quad (2.6)$$

Die Spur ist über alle Zustände des Systems auszuführen und $\beta = T^{-1}$ ist die inverse Temperatur. Der thermische Gleichgewichtserwartungswert einer Größe f ist wie folgt gegeben:

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} f e^{-\beta(H - \mu N)} \quad (2.7)$$

In dieser Arbeit interessiert der Spezialfall verschwindenden chemischen Potentials, sodass im Folgenden stets $\mu = 0$ angenommen wird. Dies entspricht Systemen mit sehr kleiner bzw. verschwindender Dichte.

Um die Spur in der thermischen Quantenfeldtheorie auszuführen (vgl. zum Folgenden [31]), wählt man die Schrödingeroperatoren für das Feld $\hat{\phi}(\mathbf{x}, 0)$ und die kanonisch konjugierte Impulsdichte $\hat{\pi}(\mathbf{x}, 0)$ sowie ihre Eigenzustände:

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}, 0) |\phi\rangle = \phi(\mathbf{x}) |\phi\rangle \quad (2.8a)$$

$$\hat{\pi}(\mathbf{x}, 0) |\pi\rangle = \pi(\mathbf{x}) |\pi\rangle \quad (2.8b)$$

2. Quantenchromodynamik im Kontinuum

Die Vektoren $|\phi\rangle$ bzw. $|\pi\rangle$ bilden jeweils ein vollständiges Orthonormalsystem. Für ein System mit dem Hamiltonfunktional $H = \int d^3x \mathcal{H}(\hat{\phi}, \hat{\pi})$ kann man damit die Zustandssumme wie folgt schreiben:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta H} = \int d\phi \langle \phi | e^{-\beta H} | \phi \rangle \quad (2.9)$$

Im obigen Ausdruck kann man den Term $\exp(-\beta H)$ als Zeitentwicklung um die imaginäre Zeit $\beta = it$ auffassen. Diese Zeitentwicklung wird nun in infinitesimale Teile aufgespalten, zwischen die Terme der Form $\int d\phi_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k|$ bzw. $\int d\pi_k |\pi_k\rangle \langle \pi_k|$ geschoben werden. Diese wirken aufgrund der Vollständigkeit als Einsoperatoren. Durch Ausführen der Impulsintegration gelangt man zu folgender Funktionalintegraldarstellung der Zustandssumme:

$$Z = \int_{\substack{\phi(\mathbf{x},0) \\ =\phi(\mathbf{x},\beta)}} \mathcal{D}\phi e^{-\int_{\beta} d^4x \mathcal{L}} \quad (2.10)$$

Dabei wurde die Abkürzung $\int_{\beta} d^4x = \int_0^{\beta} d\tau \int d^3x$ verwendet. Das Funktionalintegral über die Felder ϕ berücksichtigt die periodische Randbedingung $\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x}, \beta)$. Für Fermionen erhält man aufgrund der Grassmann-wertigen Integration antiperiodische Randbedingungen, d. h.:

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = -\psi(\mathbf{x}, \beta) \quad (2.11)$$

Wichtig ist anzumerken, dass es sich für die thermischen Erwartungswerte aufgrund der Verwendung der imaginären Zeit um euklidische Funktionalintegrale handelt, d. h. die Zeitachse ist gegenüber der Minkowski-Raumzeit um 90° Wick-rotiert. Euklidische Vektoren werden mit $x = (\mathbf{x}, x_4) = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ bezeichnet und der Zusammenhang zwischen der Zeitkomponente $x_0 = t$ eines Minkowski-Vektors mit der euklidischen Entsprechung $x_4 = \beta$ ist durch $\beta = it$ gegeben. Für die euklidische Version der Dirac'schen γ -Matrizen gilt:

$$\{\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}\} = 2\delta_{\mu\nu} \mathbf{1} \quad (2.12)$$

Die euklidische Form der QCD-Lagrangedichte lautet:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(\gamma_{\mu} D_{\mu} + m)\psi + \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^r F_{\mu\nu}^r \quad (2.13)$$

Wegen der endlichen Zeitausdehnung, die die Temperatur des Systems definiert, können für diese Richtung nur diskrete Frequenzen mit ganzzahligem n auftreten:

$$\omega_n = \begin{cases} 2\pi n T & \text{für Bosonen} \\ (2n + 1)\pi T & \text{für Fermionen} \end{cases} \quad (2.14)$$

Dies sind die sogenannten Matsubara-Frequenzen, die mit $ip_0 = p_4$ identifiziert werden. Die diskrete Struktur führt insbesondere dazu, dass Integrale über die Zeit in unendliche Summen übergehen.

2.4. Perturbativer Zugang

2.4.1. Schwachkopplungsentwicklung

Um den Erwartungswert einer Observablen \mathcal{O} zu berechnen, muss man das folgende Funktionalintegral lösen, wobei hier die euklidische Form angegeben wird:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D} [\bar{\psi}, \psi, A_\mu] \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, A_\mu) e^{-S(\bar{\psi}, \psi, A_\mu)} \quad (2.15)$$

Für eine wechselwirkungsfreie Theorie, bei der die Wirkung quadratisch in den Feldern ist, ist dies geschlossen möglich. Zunächst wird der einfachste Fall eines einzelnen Skalarfeldes ϕ betrachtet, für dessen Zweipunktfunktion man das folgende Ergebnis erhält:

$$\langle T\phi(x)\phi(y) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(y) e^{-S} = \Delta(x-y) \quad (2.16)$$

Man muss den freien Propagator $\Delta(x-y)$ durch Inversion aus dem Kern M der Wirkung bestimmen, der durch die Bilinearform $S = (\phi, M\phi)$ definiert ist. Dieses Ergebnis lässt sich zu Wicks Theorem für zeitgeordnete n -Punkt-Funktionen verallgemeinern:

$$\langle T\phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle = \begin{cases} \sum_{\sigma} \prod_{k=1}^{n/2} \Delta(x_{\sigma(2k-1)} - x_{\sigma(2k)}) & n \text{ gerade} \\ 0 & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (2.17)$$

Dabei wird über alle Permutationen von $(1, 2, \dots, n)$ summiert. Das Zusammenfassen von je zwei Feldern einer n -Punkt-Funktion zu Propagatoren wird als Kontraktion bezeichnet, sodass Wicks Theorem (vgl. [21, Kap. 4]) besagt, dass man über alle diese Kontraktionen summieren muss. Bei der Übertragung auf Fermion-Felder müssen noch die Antikommutatorbeziehungen berücksichtigt werden, die zu Vorzeichenwechseln führen können.

Wechselwirkungen entsprechen Termen, die zumindest kubisch in den Feldern sind. Für die QED ist z. B. $\mathcal{L}_I = e\bar{\psi}\gamma_\mu A_\mu\psi$. Hier ist eine geschlossene Auswertung nicht mehr möglich. Da aber die Kopplungskonstante e bzw. $e^2 = \alpha \approx 1/137$ sehr klein gegenüber 1 ist, bietet sich eine Entwicklung in der Kopplung an:

$$e^{-S} = e^{-S_0 - eS_I} \approx e^{-S_0} \left(1 - eS_I + \frac{1}{2}e^2 S_I^2 + \dots \right) \quad (2.18)$$

Damit lassen sich beliebige Prozesse auf Wicks Formel zurückführen. Durch Systematisierung gelangt man zu einem Satz von Regeln, den Feynman-Regeln, die zu einer graphischen Darstellung der Prozesse korrespondieren.

Der störungstheoretische Zugang ist in der QED extrem erfolgreich; es sei nur an das Paradebeispiel der $(g-2)$ -Bestimmung erinnert (vgl. hierzu [21, Kap. 6.3]). Für die QCD sieht die Situation allerdings wegen der asymptotischen Freiheit anders aus. Die effektive Kopplungskonstante $\alpha_S(Q)$ wird – gerade entgegengesetzt zum Fall der QED – nur für sehr große Impulsüberträge Q klein, sodass eine Kopplungsentwicklung nur für entsprechend hohe Energien und damit verbunden für sehr hohe Temperaturen Sinn macht. In das Regime, in dem eine Entwicklung nach der Kopplung nicht möglich ist, ist das Confinement einzuordnen. Aber auch der thermische Übergang selbst liegt bei Temperaturen, die für den perturbativen Ansatz zu klein sind (vgl. [2]).

Da für die genaue Untersuchung der hiermit verbundenen Phänomene die Störungstheorie nicht zur Verfügung stehen kann, müssen nichtperturbative Methoden verwendet werden. Dies ist neben der Regularisierung der Theorie die wesentliche Motivation für die Einführung der Gitter-QCD.

2.4.2. Eichfixierung und Geistfelder

Bei der Einführung der Eichfelder wurde bisher nicht berücksichtigt, dass es noch die Freiheit der Eichtransformation gibt. Für die Funktionalintegrale bedeutet dies, dass über kontinuierlich viele äquivalente Eichfeldkonfigurationen integriert wird, was zur Divergenz des Integrals führt. Alternativ sieht man das Problem beim Versuch, den Propagator durch Inversenbildung aus dem quadratischen Teil der Eichwirkung zu bestimmen, da der zu invertierende Operator singulär ist.

Um dieses Problem gerade im Hinblick auf störungstheoretische Rechnungen zu beheben, muss die Eichung fixiert werden, d. h. aus jeder Klasse von Eichfeldern, die durch Eichtransformation verbunden sind, darf nur eines zum Funktionalintegral beitragen. In kovarianter Form geschieht diese Eichfixierung durch die Methode von Faddeev und Popov [32], die ihren Ausgangspunkt im Funktionalintegral $\int \mathcal{D}(A) e^{-S(A)}$ über die Eichfelder nimmt (vgl. auch [21, Kap. 16.2]). Zur Eichfixierung fordert man für eine gegebene Funktion $G^r(A) = 0$. Diese Bedingung wird berücksichtigt über die folgende Beziehung:

$$1 = \int \mathcal{D}\alpha \delta(G^r(A)) \det\left(\frac{\delta G^r(A^\alpha)}{\delta \alpha^s}\right) \quad (2.19)$$

Dabei geht A^α durch Eichtransformation aus A hervor. Für das Funktionalintegral ergibt sich damit:

$$\int \mathcal{D}(A) e^{-S(A)} \rightarrow \int \mathcal{D}\alpha \int \mathcal{D}(A) e^{-S(A)} \delta(G^r(A)) \det\left(\frac{\delta G^r(A^\alpha)}{\delta \alpha^s}\right) \quad (2.20)$$

Wenn man eine lineare Eichung wählt, so ist $\frac{\delta G^r(A^\alpha)}{\delta \alpha^s}$ unabhängig von α , weshalb $\int \mathcal{D}\alpha$ faktorisiert und nur als multiplikative Konstante auftritt, die durch die Normierung absorbiert wird. Eine geeignete lineare Eichung hat die folgende Form:

$$G^r(A) = \partial_\mu A_\mu^r(x) - \omega^r(x) \quad (2.21)$$

Die Determinante kann man nun durch die Einführung Grassmann-wertiger Geistfelder als Funktionalintegral schreiben:

$$\det\left(\frac{\delta G^r(A^\alpha)}{\delta \alpha^s}\right) = \det\left(\frac{1}{g} \partial^2 \delta^{rs} + f^{rts} \partial_\mu A_\mu^t\right) = \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] e^{-S_{\text{Geist}}(\bar{c}, c, A)} \quad (2.22)$$

Hierbei ist die Wirkung für die Geistfelder durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$S_{\text{Geist}} = \int d^4x \bar{c}^r(x) \left(\frac{1}{g} \partial^2 \delta^{rt} + f^{rst} \partial_\mu A_\mu^s\right) c^t(x) \quad (2.23)$$

In G ist die Funktion ω beliebig zu wählen. Deshalb kann man auch über diese Funktionen mit Gauß'scher Gewichtung der Breite ξ integrieren und dann die δ -Funktion

auswerten:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}(A) e^{-S(A)} &\rightarrow \int \mathcal{D}\omega e^{-\int d^4x \frac{(\omega^r)^2}{2\xi}} \int \mathcal{D}[A, \bar{c}, c] e^{-S-S_{\text{Geist}}} \delta(G^r(A)) \\ &= \int \mathcal{D}[A, \bar{c}, c] e^{-S-S_{\text{Geist}}-\int d^4x \frac{1}{2\xi} (\partial_\mu A_\mu^r)^2} \end{aligned} \quad (2.24)$$

Der letzte Term $\mathcal{L}_{GF} = \frac{1}{2\xi} (\partial_\mu A_\mu^r)^2$ dient letztlich zur Eichfixierung und führt auf einen modifizierten Eichfeldpropagator, der hier in der Impulsdarstellung angegeben ist:

$$\Delta_{\mu\nu}^{rs}(k) = \frac{1}{k^2} \left(\delta_{\mu\nu} - (1 - \xi) \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \delta^{rs} \quad (2.25)$$

Den Fall $\xi = 1$ bezeichnet man als Feynman-Eichung.

Die obige Methode zur Eichfixierung hat den Vorteil, dass sie manifest kovariant ist. Allerdings führt sie auch die unphysikalischen Geistfelder ein. Diese müssen in einer Störungsrechnung berücksichtigt werden, da sie für die nichtabelsche Theorie über den Term $\bar{c}^r f^{rst} \partial_\mu A_\mu^s c^t$ an die Eichfelder koppeln. Der zugehörige Propagator lautet:

$$\Delta_{\text{Geist}}^{rs}(k) = \frac{1}{k^2} \delta^{rs} \quad (2.26)$$

3. Gitterformulierung der Quantenchromodynamik

Neben dem störungstheoretischen Ansatz zur Berechnung von QCD-Vorhersagen, der wegen der laufenden Kopplung auf den Bereich sehr hoher Energien beschränkt bleibt, bietet die Formulierung der Theorie auf einem diskreten Raumzeitgitter, die auf einen Ansatz Wilsons [33] zurückgeht, einen nichtperturbativen Zugang. Durch die Einführung eines Raumzeitgitters $\Gamma = a\mathbb{Z}^4$ mit dem Gitterabstand a wird aus dem euklidischen Funktionalintegral ein herkömmliches Integral über abzählbar viele Freiheitsgrade:

$$\int \mathcal{D}\phi \rightarrow \int \prod_{x \in \Gamma} d\phi(x) \quad (3.1)$$

Für die so regularisierte Theorie ergibt sich nun die Möglichkeit numerischer Simulationen. Physikalische Vorhersagen erhält man durch den Kontinuumsliches $a \rightarrow 0$, bei dem allerdings zu beachten ist, dass die Gitterparameter für Massen und Kopplungskonstanten vom Gitterabstand abhängen. Insbesondere ist der ultraviolette Fixpunkt der QCD-Kopplung $g = 0$, d. h. also der Kontinuumsliches ergibt sich für verschwindende nackte Kopplung $g(a \rightarrow 0) = 0$.

Dieses Kapitel basiert auf [8, 34, 35]. Zunächst wird die Gitterformulierung für Eichfelder und Fermionen eingeführt sowie die nichttriviale Phasenraumstruktur bei $T = 0$ für die Wilson'sche Fermiondiskretisierung diskutiert. Danach wird die Störungstheorie auf dem Gitter betrachtet.

3.1. Diskretisierte Eichfeld- und Fermionwirkungen

3.1.1. Eichfelder

Zur Formulierung des Eichsektors der gitterregularisierten QCD berücksichtigt man, dass bei der Diskretisierung anstelle der Ableitungen endliche Differenzen auftreten. Damit ist klar, dass anstelle des infinitesimalen Paralleltransports mit den Eichfeldern $A_\mu^r(x)$ ein endlicher Paralleltransport wie in Gleichung (2.5) benötigt wird. Mithin werden die Eichfreiheitsgrade durch die $SU(3)$ -Matrizen $U_\mu(x)$ beschrieben. Diese verhalten sich wie folgt unter Eichtransformationen $V \in SU(3)_F$:

$$U_\mu(x) \rightarrow V^{-1}(x + a\hat{\mu})U_\mu(x)V(x) \quad (3.2)$$

Mit jeder dieser Linkvariablen identifiziert man die gerichtete Verbindung zwischen zwei Gitterplätzen x und $x + a\hat{\mu}$. Die Spur über ein Produkt von Linkvariablen, das einem geschlossenen Weg entspricht, ist dann eichinvariant. Die einfachste entsprechende Größe ist die sogenannte Plakette:

$$U_{\mu\nu}^P(x) = U_\nu^\dagger(x)U_\mu^\dagger(x + a\hat{\nu})U_\nu(x + a\hat{\mu})U_\mu(x) \quad (3.3)$$

Damit lässt sich die Wilson'sche Eichwirkung konstruieren:

$$S_G = \beta \sum_x a^4 \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq 4} \left(1 - \frac{1}{3} \text{Re Sp } U_{\mu\nu}^P(x) \right) \quad (3.4)$$

Entwickelt man diesen Ausdruck mit $U_\mu(x) = \exp(iagA_\mu^r T^r)$ für kleine Gitterabstände, so geht er für $a \rightarrow 0$ in die Yang-Mills-Wirkung über, wenn die inverse Kopplung als $\beta = \frac{6}{g^2}$ gegeben ist.¹

Neben der oben eingeführten Wirkung kann man beliebige andere definieren, insofern sie für $a \rightarrow 0$ in die Yang-Mills-Form übergehen. Obwohl alle so gegebenen Wirkungen zur gleichen Kontinuumswirkung korrespondieren, lässt sich natürlich das Verhalten im Kontinuumslimit durch höhere Terme in a verändern. Dies ist insbesondere für numerische Simulationen wichtig, bei denen immer endliche Gitterabstände zu wählen sind. Eine solche Wirkung mit verbessertem Verhalten im Kontinuumslimit ist die sogenannte „tree-level-Symanzik“-verbesserte Eichwirkung (tlSym), die zusätzlich zur Plakette noch rechteckige (1×2) -Schleifen enthält [36, 37]. Die freien Koeffizienten vor den beiden Teilen der Wirkung sind dabei so gewählt, dass die führende Ordnung von Gitterartefakten für *tree-level* Prozesse verschwindet:

$$S_G = \beta \left(\frac{5}{3} \sum_x a^4 \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq 4} \left(1 - \frac{1}{3} \text{Re Sp } U_{\mu\nu}^P(x) \right) - \sum_x a^4 \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \frac{1}{6} \left(1 - \frac{1}{6} \text{Re Sp } (U_{\mu\nu}^{1 \times 2}(x) + U_{\mu\nu}^{2 \times 1}(x)) \right) \right) \quad (3.5)$$

3.1.2. Wilson-Fermionen

Zur Beschreibung von Fermionen auf dem Gitter gibt es verschiedene Varianten, wobei hier die Formulierung nach Wilson [33] benutzt wird. Dabei werden die Ableitungen in der Kontinuumswirkung durch endliche Differenzen ersetzt und für die kovarianten Ableitungen die Linkvariablen $U_\mu(x)$ als Paralleltransporter eingefügt. Die Fermionwirkung hat dann die Form:

$$S_F(\bar{\psi}, \psi, U) = \sum_x a^4 \bar{\psi}(x) (am + 4r) \psi(x) - \frac{1}{2a} \sum_x a^4 \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} \bar{\psi}(x + a\hat{\mu}) (r + \gamma_\mu) U_\mu(x) \psi(x) \quad (3.6)$$

Dabei wurde eine leicht modifizierte Schreibweise mit der Konvention $\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu$ benutzt. Die Terme mit r stammen aus dem sogenannten Wilsonterm, der Gitterversion des d'Alembert-Operators, der die Versechzehnfachung der fermionischen Freiheitsgrade durch das Auftreten der Doppler an den Rändern der ersten Brillouin-Zone verhindert:

$$-\frac{r}{2} a \bar{\psi}(x) \square \psi(x) = \frac{r}{2a} \bar{\psi}(x) (2\psi(x) - \psi(x + a\hat{\mu}) - \psi(x - a\hat{\mu})) \quad (3.7)$$

¹Um Mehrdeutigkeiten zu vermeiden und dennoch bei der üblichen Notation zu bleiben, werden im Weiteren sowohl die inverse Temperatur als auch die inverse Kopplung mit β bezeichnet und im Zweifelsfall wird explizit klargestellt, welche Größe gemeint ist.

In den meisten Fällen wird $r = 1$ gesetzt, was auch hier im Weiteren benutzt wird. Für $r = 0$ ginge die Wilson-Wirkung in die Wirkung für naive Fermionen mit den Dopplern über.

Den freien Propagator erhält man durch Inversion der Fermionmatrix M_{xy} , die durch die Beziehung $S = \sum_{xy} \bar{\psi}(x) M_{xy} \psi(y)$ definiert ist:

$$\Delta_W(p) = \left(i \frac{1}{a} \sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \sin(ap_\mu) + am + \frac{2r}{a} \sum_{\mu=1}^4 \sin^2(ap_\mu/2) \right)^{-1} \otimes \mathbf{1}_{\text{Farbe}} \otimes \mathbf{1}_{\text{flavour}} \quad (3.8)$$

Die modifizierte Masse $M(p) = am + \frac{2r}{a} \sum_{\mu=1}^4 \sin^2(ap_\mu/2)$ geht für verschwindendes a linear gegen am , wenn keine Impulskomponente am Rand der Brillouinzone liegt. Für eine Dopplermode mit n Impulskomponenten bei π/a hingegen ergibt sich die modifizierte Masse $M(p) = am + \frac{2r}{a} n + \mathcal{O}(a)$. Im Kontinuumslimit erhalten die Doppler also eine unendliche Masse und sind somit dynamisch nicht relevant, solange die Bedingung $r \neq 0$ erfüllt ist.

Eine oft verwendete äquivalente Darstellung erhält man durch Umskalierung der Felder:

$$a^{3/2}(am + 4r)^{1/2} \psi(x) \rightarrow \psi(x) \quad (3.9a)$$

$$a^{3/2}(am + 4r)^{1/2} \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) \quad (3.9b)$$

$$\kappa = \frac{1}{2am + 8r} \quad (3.9c)$$

κ ist der sogenannte Hopping-Parameter, mit dem sich die Hopping-Parameter-Darstellung ergibt:

$$S_F(\bar{\psi}, \psi, U) = \sum_x a^4 \left(\bar{\psi}(x) \psi(x) - \kappa \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} \bar{\psi}(x + a\hat{\mu}) (r + \gamma_\mu) U_\mu(x) \psi(x) \right) \quad (3.10)$$

3.2. Chirale Symmetriebrechung und Aoki-Phase

Die Wilson'sche Fermionformulierung verhindert das Auftreten von Dopplern. Allerdings bringt der Wilsonterm auch einige Nachteile mit sich. So treten Gitterartefakte schon in der ersten Ordnung des Gitterabstandes auf.

Die Diskussion der Nachteile der Wilson'schen Fermionwirkung ist verknüpft mit der chiralen Symmetrie der Kontinuumswirkung der QCD, d. h. der Symmetrie im Grenzfall masseloser Fermionen (vgl. [21, Kap. 19.3]):

$$U(1)_A \otimes SU(n_f)_L \otimes U(1)_V \otimes SU(n_f)_R \quad (3.11)$$

$U(1)_V$ drückt die Erhaltung der Fermionzahl aus, während die $U(1)_A$ -Symmetrie durch Quanteneffekte, die axiale Anomalie, gebrochen wird. Der Vakuumzustand mit $\langle \bar{\psi} \psi \rangle \neq 0$ ist nicht invariant unter der verbleibenden $SU(n_f)_L \otimes SU(n_f)_R$ -Symmetrie, sodass diese spontan gebrochen ist:

$$SU(n_f)_L \otimes SU(n_f)_R \rightarrow SU(n_f)_V \quad (3.12)$$

Entsprechend der Anzahl an Generatoren der spontan gebrochenen Untergruppe müssen $n_f^2 - 1$ Goldstone-Bosonen auftreten (vgl. [21, Kap. 11.1]).

Die chirale Symmetrie ist in guter Näherung für den Fall $n_f = 2$ mit den *up* und *down* Quarks realisiert, da deren Massen von unter 10 MeV verglichen mit einer typischen Energieskala $\Lambda_{\text{QCD}} \approx 200$ MeV als klein und entartet angesehen werden können. Die dabei auftretenden drei Goldstone-Bosonen sind die Pionen; ihre Masse wird in dieser Betrachtungsweise durch die Quarkmasse als kleine Störung generiert, wobei die Beziehung $m_\pi^2 \sim m_q$ gilt (vgl. [21, Kap. 19.3]).

Auf dem Gitter bricht der Wilsonterm die chirale Symmetrie explizit, sodass die spontane Symmetriebrechung der QCD erst im Kontinuum wieder hergestellt wird. In der Tat besagt das Nielsen-Ninomiya-Theorem [38], dass es unter sehr allgemeinen Voraussetzungen keine Fermiondiskretisierung geben kann, die sowohl den Bedingungen der chiralen Symmetrie als auch der Dopplerefreiheit genügt. Damit lassen sich aber die Pionen auch nicht mehr als die Goldstone-Bosonen zur spontan gebrochenen chiralen Symmetrie auffassen.

Ferner generieren die Terme der Form $r\bar{\psi}U_\mu\psi$ einen Beitrag zur Masse, der von der Wechselwirkung zwischen Fermionen und Eichfeldern und damit von der Kopplungskonstante abhängt. Insbesondere erhält man eine masselose Theorie nur dann, wenn der Massenparameter auf einen nichtverschwindenden kritischen Wert m_c (bzw. κ_c) eingestellt wird. Nur im wechselwirkungsfreien Fall ist $m_c = 0$ bzw. $\kappa_c = 1/(8r)$. Damit erhält man für nichtverschwindende Kopplung eine kritische Linie $\kappa_c(\beta)$, deren Endpunkte bei $\kappa_c(\beta \rightarrow \infty) = 1/(8r)$ und $\kappa_c(\beta = 0) = 1/4$ liegen.

Auf Aoki [39, 40] geht die Erkenntnis zurück, dass das (κ, β) -Phasendiagramm für $n_f = 2$ Wilson-Fermionen eine weitere Phase enthalten sollte. In dieser Aoki-Phase ist die *flavour* Symmetrie von $SU(2)$ nach $U(1)$ spontan gebrochen und der Ordnungsparameter $\langle \bar{\psi}i\gamma_5\tau^3\psi \rangle$ hat einen nichtverschwindenden Erwartungswert. Dieser ist ungerade unter Paritätstransformationen, sodass die Parität ebenfalls gebrochen ist. Der endliche Ordnungsparameter entspricht einer von Null verschiedenen Masse für das neutrale Pion. Die anderen beiden bleiben als Goldstone-Bosonen zu der gebrochenen *flavour* Symmetrie masselos, sodass am Rand der Phase das gesamte Pion-Triplett masselos sein muss, um die *flavour* Symmetrie wiederherzustellen. Numerische Untersuchungen [41] finden eine Aoki-Phase mit endlicher Breite bei kleinen Werten der inversen Kopplung β , d. h. im Starkkopplungsregime. Eine Skizze der Aoki-Phase im (κ, β) -Phasendiagramm für verschwindende Temperatur ist in Abbildung 3.1 zu sehen.

3.3. Störungstheorie auf dem Gitter

Wie im Kontinuum (vgl. Abschnitt 2.4.1) ist auch auf dem Gitter eine Schwachkopplungsentwicklung möglich, wobei der endliche Gitterabstand als Regulator fungiert. Darstellungen dazu findet man in den Standardwerken zur Gittereichtheorie [8, 35]. Als wesentliche Referenz wird hier der umfangreiche Artikel von Capitani [42] herangezogen.

Nach der Entwicklung der Eichfelder $U_\mu(x) = \exp(igaA_\mu^r T^r)$ dienen wie im Kontinuum die Gluonfelder A_μ^r als Freiheitsgrade für die Störungstheorie. Folglich muss im Funktionalintegral die Integration über die $SU(3)$ -Elemente U_μ durch die Integration über die Felder A_μ^r ersetzt werden. Die resultierende Funktionaldeterminante lässt sich in der Form $\exp(-S_{\text{Maß}})$ schreiben, sodass sie einen zusätzlichen Beitrag zur effektiven

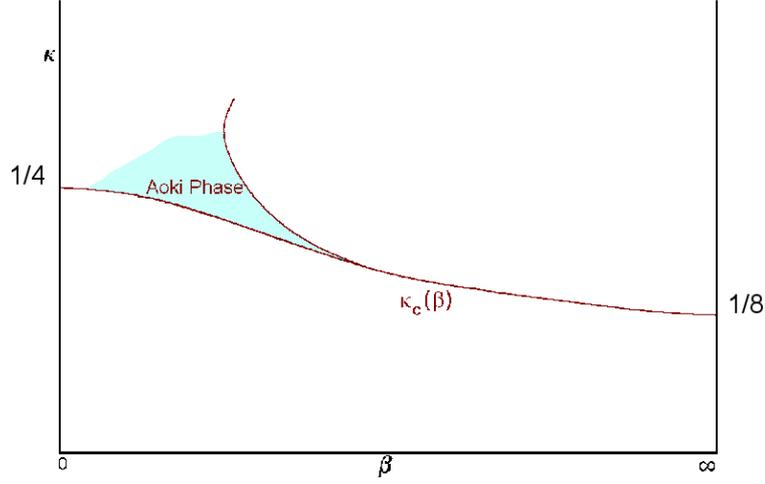


Abbildung 3.1: Skizze des (κ, β) -Phasendiagramms für $n_f = 2$ Wilsonfermionen ($r = 1$) mit der Aoki-Phase, in der die Paritäts-*flavour*-Symmetrie spontan gebrochen ist.

Wirkung liefert.

Durch die Entwicklung der Exponentialfunktion $\exp(igaA_\mu^r T^r)$ treten Terme mit beliebig vielen Eichfeldern auf, die in höheren Ordnungen der Störungstheorie zu berücksichtigen sind. Dadurch werden die aus dem Kontinuum bekannten Vertizes um eine wachsende Anzahl weiterer ergänzt. Die bis zur Ordnung $\mathcal{O}(g^2)$ wichtigen Vertizes sind in [42, S. 138] aufgelistet. Neben den bisher genannten gibt es natürlich auch Geist-Gluon-Vertizes durch die Eichfixierung (vgl. Abschnitt 2.4.2). Das Gitter-Äquivalent zum Eichpropagator lautet im Falle der Wilson'schen Eichwirkung:

$$\Delta_{G,\mu\nu}^{rs}(q) = \frac{1}{\hat{q}^2} \left(\delta_{\mu\nu} - (1 - \xi) \frac{\hat{q}_\mu \hat{q}_\nu}{\hat{q}^2} \right) \delta^{rs} \quad (3.13)$$

Die Gitterimpulse sind dabei abgekürzt als $\hat{q}_\mu = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{aq_\mu}{2}\right)$, vgl. Anhang A.1.6.

Die Terme aus der reinen Eichtheorie und damit auch der Propagator hängen von der gewählten Eichwirkung ab. Der obige Propagator und ebenso die Vertizes in [42] beziehen sich allesamt auf die Wilson'sche Eichwirkung. Für andere Wirkungen ergeben sich kompliziertere Beziehungen. Der Propagator der tISym-Wirkung etwa ist dem Anhang von [43] zu entnehmen:

$$\left(\Delta_{G,\mu\nu}^{rs}(q)\right)^{-1} = (D_\mu(q)\delta_{\mu\nu} - E_{\mu\nu}(q) + 4\xi \sin(q_\mu/2) \sin(q_\nu/2)) \delta^{rs} \quad (3.14)$$

Dabei bedeuten die Abkürzungen:

$$\begin{aligned} D_\mu(q) &= 4a_{11} \sum_\nu \sin^2(q_\nu/2) \\ &\quad - 16a_{12} \sum_\nu \sin^2(q_\nu/2) (2 - \sin^2(q_\nu/2) - \sin^2(q_\mu/2)) \\ E_{\mu\nu}(q) &= 4a_{11} \sin^2(q_\mu/2) \sin^2(q_\nu/2) \\ &\quad - 16a_{12} \sin^2(q_\mu/2) \sin^2(q_\nu/2) (2 - \sin^2(q_\nu/2) - \sin^2(q_\mu/2)) \end{aligned} \quad (3.15)$$

3. Gitterformulierung der Quantenchromodynamik

Mit $a_{11} = 5/3$ und $a_{12} = 1/12$. Für $a_{11} = 1$ und $a_{12} = 0$ erhalte man wieder die Wilson'sche Wirkung.

Der Geistpropagator hat stets die folgende Form:

$$\Delta_{\text{Geist}}^{rs}(q) = \frac{1}{\hat{q}^2} \delta^{rs} \quad (3.16)$$

4. Twisted Mass QCD

Bei der *twisted mass* QCD (tmQCD) handelt es sich um eine Modifikation der Wilson'schen Formulierung der Gitter-QCD. Sie wurde als solche von Frezzotti, Grassi, Sint und Weisz [44, 45] mit dem Ziel eingeführt, den sogenannten exzeptionellen Konfigurationen zu begegnen. Diese sind verknüpft mit Nullmoden des Wilson-Propagators, die für kleine Massen auftreten können. Der chiral verdrehte Massenterm der tmQCD verhindert das Auftreten dieser Konfigurationen.

Eine wichtige Eigenschaft der tmQCD wurde von Frezzotti und Rossi [46] gefunden: Stellt man den Hopping-Parameter κ auf seinen kritischen Wert $\kappa_c(\beta)$ ein, so wird die Masse allein durch den multiplikativ renormierbaren Parameter des chiral verdrehten Massenterms bestimmt und die Theorie ist automatisch $\mathcal{O}(a)$ -verbessert.

Eine aktuelle Übersicht über die tmQCD findet man in [14]. Daneben wird hier auf [47] zurückgegriffen. Während in der angegebenen Literatur auch eine Formulierung mit chiral verdrehtem Massenterm für mehrere *flavours* diskutiert wird, wird hier nur der Fall zweier massenentarteter Quarks eine Rolle spielen, sodass die Fermionfelder im Folgenden stets als *flavour* Doublets aufzufassen sind. Der erste Abschnitt dient zur Einführung der Formulierung der tmQCD, während der zweite sich mit der automatischen $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung beschäftigt. Zuletzt wird die nichttriviale Phasenraumstruktur bei verschwindender Temperatur vorgestellt.

4.1. Formulierung der tmQCD

Als Ausgangspunkt für die Einführung der tmQCD dient hier die fermionische Kontinuumswirkung:

$$S_F = \int d^4x \bar{\psi}(x) (\gamma_\mu D_\mu + M) \psi(x) \quad (4.1)$$

Die masselose Wirkung besitzt die chirale Symmetrie, die durch die Dynamik spontan gebrochen wird. Der Massenterm führt zu einem expliziten Bruch der axialen Symmetrie, sodass nur der Vektoranteil übrig bleibt. Insofern kann man davon sprechen, dass die Form des Massenterms die übrigbleibende Symmetrie vorgibt und als äußeres Feld die Richtung der Symmetriebrechung bestimmt. Deshalb sollte eine andere Wahl des Massenterms zu einer physikalisch äquivalenten Formulierung führen.

Eine veränderte Form des Massenterms lässt sich als Koordinatentransformation der Fermionfelder auffassen. Dabei führt diese Transformation den Übergang aus der ursprünglichen physikalischen Basis (ψ) in die neue chiral gedrehte, sogenannte „twisted basis“ (χ) durch und lässt sich wie folgt schreiben, wobei die dritte Paulimatrix τ^3 auf die *flavour* Komponenten wirkt:

$$\psi = e^{\frac{i}{2}\omega\gamma_5\tau^3} \chi \quad (4.2a)$$

$$\bar{\psi} = \bar{\chi} e^{\frac{i}{2}\omega\gamma_5\tau^3} \quad (4.2b)$$

Der Ableitungsterm ist wegen $\{\gamma_\mu, \gamma_5\} = 0$ invariant unter dieser Transformation, während sich der Massenterm verändert:

$$\begin{aligned}\bar{\psi}M\psi &= \bar{\chi}Me^{i\omega\gamma_5\tau^3}\chi \\ &= \bar{\chi}M(\cos(\omega) + i\gamma_5\tau^3\sin(\omega))\chi \\ &= \bar{\chi}(m + i\mu\gamma_5\tau^3)\chi\end{aligned}\tag{4.3}$$

Dabei wurden in der letzten Zeile von (4.3) $m = M \cos(\omega)$ und $\mu = M \sin(\omega)$ definiert. Offenbar gilt für die unrenormierte Masse M der Quarks:

$$M = \sqrt{m^2 + \mu^2}\tag{4.4}$$

μ ist der neue Massenparameter zum chiral verdrehten Term. Für den Fall $\omega = \pi/2$ – also $m = 0$, $\mu = M$ – ergibt sich die maximale Verdrehung des Massenterms gegenüber dem restlichen Teil der Wirkung, sodass dies auch als voller bzw. maximaler *twist* bezeichnet wird. Da die Transformation eine nicht spontan gebrochenen Symmetrie beschreibt, liefert die Wirkung in der neuen Basis eine äquivalente Beschreibung der QCD [48]:

$$S_F = \int d^4x \bar{\chi}(x) (\gamma_\mu D_\mu + m + i\mu\gamma_5\tau^3) \chi(x)\tag{4.5}$$

Geht man nun über zu einer gitterregularisierten Theorie mit Wilson'schen Fermionen, so bricht der Wilsonterm die Invarianz des Ableitungsteils der Wirkung unter der Basistransformation. Dennoch kann man einen chiral verdrehten Massenterm einführen. Da die ursprüngliche Gitterwirkung und diejenige mit dem zusätzlichen Massenterm anders als im Kontinuum nicht durch eine Transformation verbunden sind, handelt es sich allerdings um verschiedene Regularisierungen der Kontinuumswirkung, die erst im Kontinuumsmlimes zusammenfallen. Insbesondere bricht die tmQCD nicht nur die chirale sondern auch die Paritäts-*flavour*-Symmetrie.

Ist M_W^c die Wilson'sche Fermionmatrix mit kritischer Masse m_c , so setzt man für die Fermionmatrix der tmQCD:

$$M_{\text{tm}} = M_W^c + m + i\mu\gamma_5\tau^3\tag{4.6}$$

Mit dem Massenparameter M erhält man damit für die unrenormierten Parameter:

$$m = M \cos(\omega)\tag{4.7a}$$

$$\mu = M \sin(\omega)\tag{4.7b}$$

Umgekehrt gilt:

$$\tan \omega = \frac{\mu}{m} = \frac{\mu}{m_0 - m_c}\tag{4.7c}$$

Eine wichtige Feststellung ist (vgl. z. B. [47, Kap. 4.3]), dass ein Verdrehungswinkel $\omega = \pi/2$ unter Renormierung erhalten bleibt. In diesem Fall muss lediglich die kritische Masse fixiert werden. Die physikalische Quarkmasse wird dann allein durch das multiplikativ renormierbare μ bestimmt.

4.1.1. Der freie Propagator

Um eine Schwachkopplungsentwicklung durchführen zu können, wird der Fermionpropagator der tmQCD benötigt. Es ist klar, dass dieser für verschwindendes μ in den Wilson'schen Propagator (3.8) übergehen muss. Die Herleitung des tmQCD-Propagators erfolgt über die Bedingung, dass der Propagator gerade die inverse Fermionmatrix ist:

$$M_{\text{tm}}\Delta_{\text{tm}} = (M_{\text{W}} + i\mu\gamma_5\tau^3)\Delta_{\text{tm}} = \mathbf{1} \quad (4.8)$$

Durch den Ansatz $\Delta_{\text{tm}} = \Delta_{\text{W}}(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \mu^n \Delta_n)$ gelangt man zu folgender Form für den freien Propagator:

$$\Delta_{\text{tm}} = \Delta_{\text{W}} \frac{\mathbf{1} - i\mu\gamma_5\tau^3\Delta_{\text{W}}}{1 + \mu^2 |\Delta_{\text{W}}|^2} \quad (4.9)$$

Dabei ist $|\Delta_{\text{W}}|^2 = \Delta_{\text{W}}\Delta_{\text{W}}^\dagger$ proportional zur Einheitsmatrix und im Nenner als skalare Größe zu lesen.

Durch Umformungen erhält man eine alternative Impulsraum-Schreibweise, die auch in [14] benutzt wird:

$$\Delta_{\text{tm}}(p) = \frac{-i\sum_{\nu} \gamma_{\nu}\bar{p}_{\nu} + \frac{1}{2}\hat{p}^2 + m - i\mu\gamma_5\tau^3}{\bar{p}^2 + (\frac{1}{2}\hat{p}^2 + m)^2 + \mu^2} \otimes \mathbf{1}_{\text{Farbe}} \quad (4.10)$$

4.1.2. Symmetrien der tmQCD

Die Symmetrien der tmQCD werden in [14, Kap. 2.4] ausführlich erläutert. An dieser Stelle sollen die wesentlichen Symmetrien, die dem Beweis der automatischen $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung zugrunde liegen, zusammengetragen werden.

Obwohl die Parität P wegen des chiral verdrehten Massenterms keine Symmetrie mehr ist, kann man eine daraus abgeleitete neue Symmetrieoperation P_{μ} finden, die in [14] als „twisted parity“ bezeichnet wird. Dabei wird berücksichtigt, dass der neue Massenterm ungerade unter Paritätstransformationen ist:

$$P_{\mu} = P \times [\mu \mapsto -\mu] \quad (4.11)$$

Außerdem ist die diskrete chirale Transformation \mathcal{R}_5^1 von Bedeutung:

$$\mathcal{R}_5^1 = \begin{cases} \chi & \rightarrow i\gamma_5\tau^1\chi \\ \bar{\chi} & \rightarrow \bar{\chi}i\gamma_5\tau^1 \end{cases} \quad (4.12)$$

Diese Transformation ist eine Symmetrie der Kontinuumswirkung (4.5), wenn die Masse allein durch den chiral verdrehten Massenterm gegeben ist, d. h. wenn $\mu = M$ und $m = 0$ gilt.

In der Gitterwirkung bricht der Wilsonterm diese Symmetrie. Es ist aber möglich, durch Einführung einer Operation \mathcal{D} , die alle Terme mit $(-1)^{d_m}$ multipliziert, wobei d_m die Massendimension der auftretenden Felder ist, wiederum eine Symmetrie der Gitterwirkung zu erhalten:

$$\mathcal{R}_5^1 \times \mathcal{D} \times [\mu \mapsto -\mu] \quad (4.13)$$

4.2. Maximaler Twist

4.2.1. Automatische Verbesserung

Die automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung [46] für die tmQCD gehört zu den großen Vorteilen dieser Formulierung. Sie ergibt sich für den maximalen *twist*, d. h. für $\omega = \pi/2$, wenn die Masse allein durch den chiral verdrehten Term bestimmt wird.

Für den Beweis der automatischen $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung sind eine Reihe von Herangehensweisen vorgestellt worden [49, 50, 51]. [14] bietet eine zusammenfassende Diskussion des Beweises, die hier kurz skizziert werden soll, um deutlich zu machen, dass er auch bei endlichen Temperaturen gültig bleibt. Den Ausgangspunkt bildet die effektive Wirkung, die die Gitter-QCD nahe am Kontinuumslimit darstellt und auf Symanzik zurückgeht [52]:

$$S_{\text{eff}} = S_0 + aS_1 + a^2S_2 \dots \quad (4.14)$$

Dabei ist S_0 gerade die entsprechend zu regularisierende Kontinuumswirkung. Genau wie die Wirkung müssen auch die gegebenenfalls betrachteten aus den Fermion- und Eichfeldern zusammengesetzten Felder ϕ als effektive Größen geschrieben werden, d. h. also $\phi_{\text{eff}} = \phi_0 + a\phi_1 + a^2\phi_2 + \dots$

Die Berechnung von Erwartungswerten, z. B. einer n -Punkt-Funktion, bei der alle Punkte x_j in endlichem Abstand voneinander gehalten werden, erfolgt bezüglich der Kontinuumswirkung:

$$\begin{aligned} \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D} [\bar{\psi}, \psi, A_\mu] \phi(x_1) \dots \phi(x_n) e^{-S_0} (1 - aS_1 + \dots) \\ &= \langle \phi_0(x_1) \dots \phi_0(x_n) \rangle_{S_0} \\ &\quad - a \int d^4y \langle \phi_0(x_1) \dots \phi_0(x_n) \mathcal{L}_1(y) \rangle_{S_0} \\ &\quad + a \sum_{k=1}^n \langle \phi_0(x_1) \dots \phi_1(x_k) \dots \phi_0(x_n) \rangle_{S_0} + \mathcal{O}(a^2) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Von der Normierung Z kommen keine Beiträge in dieser Ordnung, da der $\mathcal{O}(a)$ -Term proportional zu $\langle S_1 \rangle$ ist und damit aus gleich zu diskutierenden Symmetriegründen verschwinden muss. Die y -Abhängigkeit der Lagrangedichte ist über die entsprechenden Felder zu verstehen. Die Rolle von möglichen Kontakttermen für $y = x_j$ wird bei [49] und [53] diskutiert. Diese können in die Definition der Felder ϕ_1 absorbiert werden.

In [53] wurden die möglichen Beiträge zu S_1 im Falle reiner Wilson Fermionen untersucht. Der einzige relevante Term ist dabei von der Sheikholeslami-Wohlert-Form:

$$S_1 = c_{SW} \int d^4x \bar{\psi}(x) \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \psi(x) \quad (4.16)$$

Ein ähnlicher Term wäre zusätzlich für die tmQCD-Wirkung denkbar:

$$S'_1 = c' \int d^4x \bar{\psi}(x) \gamma_5 \tau_3 \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \psi(x) \quad (4.17)$$

Wesentlich ist nun die Feststellung, dass S_0 unter gewissen Symmetrien invariant ist, die nicht spontan gebrochen werden. Damit Erwartungswerte $\langle O \rangle_{S_0}$ einen nicht verschwindenden Wert annehmen können, muss diese Invarianz auch für die entsprechenden

Operatoren O gelten. Die relevanten Symmetrieoperationen wurden in Abschnitt 4.1.2 beschrieben. Dass spontane Symmetriebrechung für diese nicht auftreten kann, wird in [14, Kap. 3.2] diskutiert. Die erweiterte Parität (4.11) schließt das Auftreten eines Terms der Form S'_1 – wie in (4.17) angegeben – aus, sodass die gesamte $\mathcal{O}(a)$ -Korrektur durch den Sheikholeslami-Wohlert-Term bestimmt wird.

Da die chirale Symmetrie spontan gebrochen ist, muss die Richtung des chiralen Kondensats festgelegt werden. Dies geschieht durch das die Symmetrie explizit brechende äußere Feld, also die Masse [50]. Für das weitere Vorgehen ist nun die Annahme des maximalen Verdrehungswinkels entscheidend, d. h. $\omega = \pi/2$ sowie $m_R = 0$ und $\mu_R = M_R$. In diesem Fall gilt:

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle \bar{\psi}i\gamma_5\tau_3\psi \rangle = \nu(M_R) \quad (4.18)$$

Dabei ist mit $\lim_{M_R \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \nu(M_R) \neq 0$ der durch die spontane Symmetriebrechung bedingte nichtverschwindende Erwartungswert des chiralen Kondensats bezeichnet.

Die Kontinuumswirkung weist für $\omega = \pi/2$ die diskrete Symmetrie \mathcal{R}_5^1 (4.12) auf.¹ Da \mathcal{R}_5^1 sowohl $\langle \bar{\psi}i\gamma_5\tau_3\psi \rangle$ als auch $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ invariant lässt, handelt es sich um eine exakte Symmetrie der Kontinuumsstheorie. Wichtig ist hierbei, dass $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ unter \mathcal{R}_5^1 eigentlich sein Vorzeichen ändert; dies spielt nur für die hier betrachtete maximale chirale Verdrehung keine Rolle, da $\langle \bar{\psi}\psi \rangle = 0$ gilt. Letztlich weiß man jetzt, dass nur \mathcal{R}_5^1 -gerade Operatoren von Null verschiedene Erwartungswerte bezüglich S_0 besitzen.

Die Korrektur in erster Ordnung, S_1 aus Gleichung (4.16), ist \mathcal{R}_5^1 -ungerade. Damit ist klar, dass $\langle S_1 \rangle = 0$ gelten muss. Außerdem verschwinden für alle \mathcal{R}_5^1 -geraden Operatoren O die Ausdrücke der Form $\langle O\mathcal{L}_1 \rangle$, da der Erwartungswert einer insgesamt \mathcal{R}_5^1 -ungeraden Größe gebildet wird.

Betrachtet man Gleichung (4.15), bleiben als einzig mögliche $\mathcal{O}(a)$ -Beiträge noch Terme der Form $\langle \phi_0(x_1) \dots \phi_1(x_k) \dots \phi_0(x_n) \rangle_{S_0}$. Um auch diese auszuschließen, ist noch zu zeigen, dass ϕ_1 ungerade bezüglich der Transformation \mathcal{R}_5^1 ist. Dazu berücksichtigt man, dass alle Summanden $a^k \phi_k$ in der Entwicklung des Operators ϕ dessen Gittersymmetrien genügen müssen. ϕ_1 hat gegenüber ϕ_0 wegen des zusätzlichen Faktors a gerade eine um 1 veränderte Massendimension. Damit das Transformationsverhalten unter der Gittersymmetrie $\mathcal{R}_5^1 \times \mathcal{D} \times [\mu \rightarrow -\mu]$ unverändert bleibt, muss ϕ_1 also zwingend \mathcal{R}_5^1 -ungerade sein. Mit dieser Feststellung ist der Beweis der automatischen $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung bei maximaler chiraler Verdrehung vollständig.

Letztlich ist festzustellen, dass der obige Beweis unabhängig davon gilt, ob der Fall endlicher Temperaturen betrachtet wird. Die eingehenden Symmetrieoperationen basieren – insofern sie die Raumzeitkoordinaten betreffen – auf der Parität, die zwischen Zeit- und Raumkoordinaten unterscheidet: $P : x = (\mathbf{x}, t) \mapsto (-\mathbf{x}, t)$. Die automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung für die tmQCD bei maximalem *twist* bleibt folglich auch im Fall $T \neq 0$, der durch eine endliche Ausdehnung in Zeitrichtung charakterisiert ist, erhalten.

4.2.2. Kritische Masse

In den Beweis der automatischen Verbesserung eingegangen ist zum einen die Gültigkeit der Symanzik-Entwicklung. Zum anderen ist hervorzuheben, dass Größen, die ungerade unter \mathcal{R}_5^1 sind und somit verschwindenden Erwartungswert im Kontinuumslimit besitzen, $\mathcal{O}(a)$ -Effekte aufweisen können. Ferner ist die Definition für den maximalen *twist*,

¹Hier wird die Notation aus [14] verwendet; in [50] wird dieselbe Symmetrie als T_1 bezeichnet

so wie sie hier verwendet wurde – $\langle \bar{\psi}\psi \rangle = 0$ – für Gittersimulationen wenig praktisch. Eine bessere Festlegung gelingt durch die PCAC-Relation:

$$m_{\text{PCAC}} = \frac{\sum_{\mathbf{x}} \langle \partial_0 A_0^r(x) P^r(0) \rangle}{2 \sum_{\mathbf{x}} \langle P^r(x) P^r(0) \rangle} \quad (4.19)$$

Dabei sind $P^r(x)$ die pseudoskalare Dichte und $A_\mu^r(x)$ der Axialvektorstrom.

$$P^r(x) = \bar{\chi}(x) \gamma_5 \frac{\tau^r}{2} \chi(x) \quad (4.20)$$

$$A_\mu^r(x) = \bar{\chi}(x) \gamma_\mu \gamma_5 \frac{\tau^r}{2} \chi(x) \quad (4.21)$$

In [14, Kap. 3.2] wird diskutiert, dass $\mathcal{O}(a)$ -Unsicherheiten in der Bestimmung der kritischen Masse die $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung nicht zunichte machen, da sie ungerade Größen unter der chiral verdrehten Parität P_μ sind und damit nur die $\mathcal{O}(a^2)$ -Effekte in Erwartungswerten modifizieren. Ein potentielles Problem stellen aber diese $\mathcal{O}(a^2)$ -Korrekturen dar, da sie für kleine μ sehr groß werden können. Es ergibt sich eine Grenze für den renormierten Massenparameter, unterhalb derer die $\mathcal{O}(a^2)$ -Korrekturen zu groß werden. Durch die Wahl der Bedingung, mit der die kritische Masse bestimmt wird, wird die Größe dieser Untergrenze beeinflusst [14, Kap. 3.3.1]; dabei führt die PCAC-Bedingung zu der Forderung $\mu_R > a^2 \Lambda^3$.

Da die PCAC-Bedingung in der chiral verdrehten Basis formuliert ist, muss die kritische Masse eigentlich für jedes in einer Simulation verwendete μ einzeln bestimmt werden, sodass man Werte $m_c(\mu)$ erhält. Alternativ kann als Definition für die kritische Masse die chirale Extrapolation $m_c(\mu \rightarrow 0)$ benutzt werden. Dies entspricht der Einführung einer $\mathcal{O}(a)$ -Unbestimmtheit in der kritischen Masse, die nach den obigen Argumenten nur zu einer Modifikation der $\mathcal{O}(a^2)$ -Effekte in Erwartungswerten führt. Da in jedem Fall $\mathcal{O}(a)$ -Unsicherheiten in die kritische Masse einfließen, wird anstelle der Extrapolation auch die kritische Masse $m_c(\mu_{\min})$ zum kleinsten verwendeten μ_{\min} als Definition benutzt [54].

4.3. Phasenstruktur bei $T = 0$

Gegenüber dem Phasendiagramm bei verschwindender Temperatur für reine Wilson-Fermionen ist dasjenige für die tmQCD um eine Dimension zu einem dreidimensionalen (κ, β, μ) -Raum erweitert. Der Ordnungsparameter für die Aoki-Phase – vgl. Abschnitt 3.2 – wird jetzt bis auf einen Normierungsfaktor als der chiral verdrehte Massenterm betrachtet, der außerhalb der $(\mu = 0)$ -Ebene die Paritäts-*flavour*-Symmetrie überall explizit bricht. Mithilfe der chiralen Störungstheorie sind zwei mögliche Szenarien für Phasenübergänge in diesem Phasendiagramm ausgemacht worden [55, 56].

Dies ist zum einen das schon bei den Wilson-Fermionen ohne *twist* bekannte Aoki-Szenario, das für die tmQCD auf die $(\mu = 0)$ -Ebene beschränkt bleibt. Das zweite Szenario, das in [56] als „normal scenario“ bezeichnet wird, beschreibt für festes β eine Phasenübergangslinie erster Ordnung, die sich senkrecht zur (κ, β) -Ebene bis zu einem Wert $\mu_c \sim a^2$ erstreckt, um dort in einem kritischen Endpunkt zweiter Ordnung zu enden. Der Schnitt mit der (κ, β) -Ebene entspricht gerade dem kritischen Hopping-Parameter $\kappa_c(\beta)$. In Abbildung 4.1 sind die beiden Szenarien für festes β in der (m, μ) -Ebene skizziert.

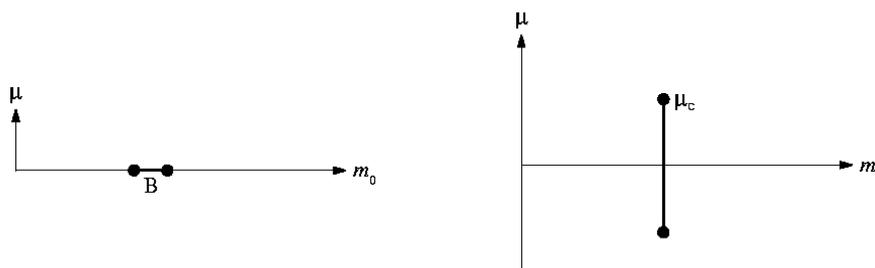


Abbildung 4.1: Die beiden Phasenübergangsszenarien, die sich aus der chiralen Störungstheorie ergeben: Aoki-Szenario (links) und normales Szenario (rechts); aus [56].

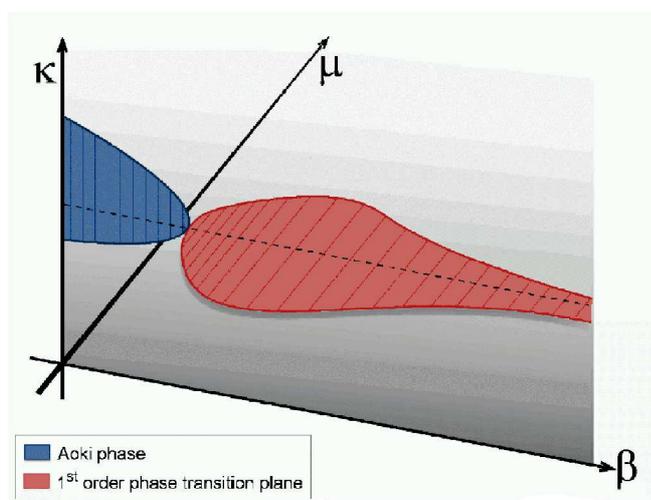


Abbildung 4.2: Skizze des ($T = 0$)-Phasendiagramms für Fermionen mit chiral verdrehtem Massenterm; aus [57].

Das Aoki-Szenario ist schon für normale Wilson-Fermionen im Starkkopplungsregime etabliert. Numerische Simulationen (vgl. [57] und Referenzen darin) zeigen, dass sich für größere β an die Aoki-Phase das zweite Szenario anschließt (vgl. Abbildung 4.2).

5. Numerische Simulationen

Um Vorhersagen aus der QCD abzuleiten, müssen die entsprechenden Funktionalintegrale ausgewertet werden. Dies ist für die gitterregularisierte Theorie bei endlichen Volumina numerisch möglich, da es nur endlich viele Freiheitsgrade gibt. Dennoch bleibt die Zahl der durchzuführenden Integrationen sehr groß, sodass in der Praxis auf leistungsstarke Parallelrechner und Monte-Carlo-Verfahren zurückgegriffen werden muss. Bei der Monte-Carlo-Integration wird nur eine gewisse Auswahl der möglichen Feldkonfigurationen betrachtet. Diese Konfigurationen werden zufällig mit einer Wahrscheinlichkeit, die ihrer Gewichtung $\exp(-S)$ im Funktionalintegral entspricht, gewählt. Diese Gewichtung wird als „importance sampling“ bezeichnet und wird durch die Euklidisierung möglich, aufgrund derer $\exp(-S)$ positiv reell ist.

Der verwendete Algorithmus soll dann eine möglichst schnelle Annäherung an das tatsächliche Ergebnis liefern. In jedem Fall sollte der Algorithmus exakt sein, d. h. gegen die richtige Wahrscheinlichkeitsverteilung konvergieren. Der für die Simulationen in dieser Arbeit zur Verfügung stehende Algorithmus ist ein generalisierter Hybrid-Monte-Carlo (GHMC) [58]. Im nächsten Abschnitt wird der zu Grunde liegende Hybrid-Monte-Carlo (HMC) [59] kurz beschrieben und es werden einige Modifikationen im Rahmen der Erweiterung zum GHMC genannt.

Im zweiten Teil wird die statistische Analyse der Daten, die man aus einer numerischen Simulation erhält, erläutert. Dieser Teil stützt sich im Wesentlichen auf [60] sowie auf [8]. Der letzte Abschnitt stellt einige für diese Arbeit wichtige Gitter-Observablen vor.

5.1. HMC-Algorithmus

Der HMC-Algorithmus verbindet zwei Methoden für die Erzeugung neuer Konfigurationen. Zum einen gibt es eine stochastische Komponente, bei der die Konfigurationen gemäß ihrer Wirkung gewichtet werden; zum anderen gibt es eine deterministische Entwicklung (Molekulardynamik). Hierfür werden hermitesche spurlose Impulse $P_{x\mu}$ eingeführt. Die Felder entwickeln sich dann gemäß den Hamilton'schen Bewegungsgleichungen für die folgende Hamiltonfunktion:

$$H(P, U, \phi, \phi^\dagger) = \frac{1}{2} \sum_{x\mu} P_{x\mu}^2 + S_G(U) + S_{\text{PF}}(U, \phi, \phi^\dagger) \quad (5.1)$$

Dabei werden die Fermionfelder durch bosonische Pseudofermionfelder ersetzt. Hierfür definiert man $Q = \gamma_5 M$, wobei M die Fermionmatrix für einen *flavour* sein soll. Aufgrund der Beziehung $M^\dagger = \gamma_5 M \gamma_5$ ist Q hermitesch und man kann die folgende Ersetzung durchführen:

$$\int \mathcal{D} [U, \bar{\psi}, \psi] e^{-S_F(U, \bar{\psi}, \psi) - S_G(U)} = \int \mathcal{D} [U, \phi, \phi^\dagger] e^{-S_G(U) - S_{\text{PF}}(U, \phi, \phi^\dagger)} \quad (5.2)$$

Die Pseudofermion-Wirkung ist quadratisch in den Feldern ϕ, ϕ^\dagger : $S_{\text{PF}} = \phi^\dagger Q^{-2} \phi$. Dies lässt sich auch ausdrücken als $S_{\text{PF}} = R^\dagger R$ mit $\phi = QR$. Die Pseudofermionfelder lassen sich also aus einer Gauß'schen Verteilung $\exp(-R^\dagger R)$ gewinnen.

Somit besteht der erste Schritt des HMC-Algorithmus in der Erzeugung von Gauß-verteiltern Pseudofermionfeldern und Impulsen P , die für die Molekulardynamik benötigt werden.

Der nächste Schritt ist die Generierung neuer Eichfelder und Impulse durch Integration der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen in der Monte-Carlo Zeit t :

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dH}{dP} = P \quad \frac{dP}{dt} = -\frac{dH}{dU} = -\frac{dS}{dU} \quad (5.3)$$

Da bei der numerischen Lösung der vorhergehenden Gleichungen Diskretisierungsfehler auftreten, schließt sich noch ein sogenannter Metropolis „accept/reject“ Schritt an. Die neue Konfiguration (U') wird mit einer Wahrscheinlichkeit p_A angenommen:

$$p_A = \min \left(1, \exp \left(- (H(P', U', \phi, \phi^\dagger) - H(P, U, \phi, \phi^\dagger)) \right) \right) \quad (5.4)$$

Wenn das gewählte Integrationsschema reversibel und volumenerhaltend ist, so ist der HMC-Algorithmus exakt.

In [58] wird der generalisierte Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus (GHMC) beschrieben, der für diese Arbeit verwendet wird. Zum einen wird dort die sogenannte „multiple time scale“-Integration eingeführt, die berücksichtigt, dass die Wirkung in mehrere Teile getrennt werden kann (insb. Eichwirkung und Pseudofermionwirkung), deren Variationen unterschiedlich große Beträge besitzen. Je größer die Variation desto kleiner sollte der Zeitschritt sein, um kleine Diskretisierungsfehler zu behalten. Durch die Einführung unterschiedlich großer Zeitschritte für die einzelnen Anteile der Wirkung wird somit die Leistung des Algorithmus' optimiert, da kleine Diskretisierungsfehler zwar längere Zeitschritte erfordern aber dafür die Akzeptanzrate erhöhen.

Die zweite Methode wird als „mass preconditioning“ bzw. Hasenbusch-Beschleunigung (vgl. [61]) bezeichnet. Dabei wird nicht nur ein Pseudofermionpaar eingeführt sondern zwei. Dadurch erhält man einen weiteren freien Parameter, den man so einstellen kann, dass die Leistung des Algorithmus' verbessert wird.

5.2. Analyse von Monte-Carlo Daten

5.2.1. Monte-Carlo-Simulation und Markov-Prozesse

Bei der Monte-Carlo Simulation werden die einzelnen Feldkonfigurationen auf Grundlage der unmittelbar vorhergehenden zufällig erzeugt. Dies bezeichnet man als Markov-Prozess (vgl. [60]). Für die Wahrscheinlichkeit $P(X_n = \mathcal{U} | X_{n-1} = \mathcal{U}')$ im n -ten Schritt die Konfiguration $\mathcal{U} = \{(\bar{\psi}(x), \psi(x), U_\mu(x)), x \in \Gamma\}$ zu finden, wenn zuvor die Konfiguration \mathcal{U}' vorlag, gilt dann:

$$P(X_n = \mathcal{U} | X_{n-1} = \mathcal{U}') = w(\mathcal{U}', \mathcal{U}) P(X_{n-1} = \mathcal{U}') \quad (5.5)$$

Interpretiert man die Konfigurationen als Elemente des Ereignisraums Ω , so ist $W = (w(\mathcal{U}', \mathcal{U})) \in M(|\Omega| \times |\Omega|)$ die Übergangsmatrix.

Das eigentliche Ziel ist die Berechnung von Erwartungswerten für eine Observable A , d. h. von Funktionalintegralen:

$$\langle A \rangle = \int \mathcal{D} [\psi, \bar{\psi}, U] A(\psi, \bar{\psi}, U) e^{-S(\bar{\psi}, \psi, U)} \quad (5.6)$$

In der Simulation ersetzt man diesen Erwartungswert durch das Ensemblemittel über die verschiedenen erzeugten Konfigurationen:

$$\langle A \rangle \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N A(\mathcal{U}_j) = \sum_{\mathcal{U}} A(\mathcal{U}) P(\mathcal{U}) \quad (5.7)$$

Die erzeugten Konfigurationen definieren durch die Häufigkeit ihres Auftretens ein Wahrscheinlichkeitsmaß $P(\mathcal{U})$, das sich – wenn die Ersetzung des Erwartungswertes durch das Ensemblemittel gerechtfertigt sein soll – für lange Messungen der Boltzmann-Verteilung e^{-S} annähern muss.

5.2.2. Jackknife-Binning

In der Praxis möchte man bestimmte Observable, die als Funktionale der Felder gegeben sind, bestimmen, d. h. aus jeder Feldkonfiguration erzeugt man einen entsprechenden Datenpunkt:

$$\mathcal{U}_j \rightarrow a_j = a(\mathcal{U}_j) \quad (5.8)$$

Die ersten a_j werden dabei durch Konfigurationen erzeugt, die weit vom Gleichgewicht entfernt sind. Im Grenzwert unendlich langer Messungen spielt dies für die Bestimmung der Erwartungswerte mithilfe des Ensemblemittels keine Rolle. Bei den in der Realität endlichen Datensätzen ist es aber sinnvoll, die ersten Werte nicht zu berücksichtigen. Typischerweise kann man gut per Augenmaß eine entsprechende Thermalisierungsphase ausmachen, nach der die Datenpunkte vergleichsweise nah um einen Gleichgewichtswert schwanken. Im Weiteren soll $\{a_j\}$ den Satz von N Datenpunkten bezeichnen, der zur Auswertung herangezogen wird.

Da die a_j aus einem Markov-Prozess stammen, sind sie untereinander korreliert, was bei der Bestimmung von Unsicherheiten berücksichtigt werden muss. Dennoch bleibt für den Erwartungswert $\langle a \rangle$ das arithmetische Mittel \bar{a} der beste Schätzer:

$$\langle a \rangle \rightarrow \bar{a} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N a_j \quad (5.9)$$

Um die Korrelationen bei der Berechnung des statistischen Fehlers zu berücksichtigen, greift man auf das sogenannte *Jackknife-Binning* zurück. Die Idee dieser Methode (vgl. z. B. [60]) besteht darin, aus den gegebenen N Datenpunkten N_B Blöcke (*bins*) der Länge B vorzumitteln. Wenn diese Blöcke groß genug sind, so können die vorgemittelten Datenpunkte als untereinander unkorreliert angenommen werden. Außerdem ergibt sich der Vorteil, dass die neuen Daten aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes annähernd einer Gauß'schen Verteilung genügen, sodass die Fehleranalyse standardmäßig erfolgen kann. Für die Varianz ergibt sich damit:

$$\sigma_{\bar{a}}^2 = \frac{N_B - 1}{N_B} \sum_{k=1}^{N_B} (b_k - \bar{b})^2 \quad (5.10)$$

Dabei sind die b_k die über jeweils einen Block vorgemittelten Datenpunkte. Um die Methode stabiler zu machen, mittelt man nicht über den Inhalt des jeweiligen Blocks, sondern verwendet gerade die nicht in diesem enthaltenen Datenpunkte. So verfügt jeder einzelne vorgemittelte Wert über eine größere Statistik.

Eine einfach zu verwendende und robuste Formel für Größen, die selbst Funktionen der primären Daten sind, erhält man, indem man in der obigen Formel die b_k durch $f(b_k)$ ersetzt und für den Mittelwert, das Mittel über die sekundären Werte $\bar{f} = \sum f(b_k)/N_B$ wählt:

$$\sigma_{\bar{f}}^2 = \frac{N_B - 1}{N_B} \sum_{k=1}^{N_B} (f(b_k) - \bar{f})^2 \quad (5.11)$$

Die optimale Größe der Blöcke kann man als Plateau aus Diagrammen, in denen die Fehlerabschätzung gegen die Blockgröße aufgetragen ist, ablesen.

5.3. Observable

5.3.1. Plakette und Polyakov-Loop

Es gibt zwei Gitter-Observable der reinen Eichtheorie, die für Simulationen und die Suche nach Phasenübergängen von einiger Bedeutung sind. Die erste ist der Erwartungswert der Plakette $\langle P \rangle := \langle \text{Sp } U^P \rangle$.

Auch bei der Verwendung verbesserter Eichwirkungen, wie etwa der t1Sym-Wirkung, erhält man mit diesem Erwartungswert ein Maß für die mittlere Größe der euklidischen Wirkung des Eichsektors und damit für die innere Energie. Der Deconfinement-Phasenübergang geht dementsprechend mit einem Anstieg des Erwartungswertes der Plakette einher.

Endliche Temperaturen entsprechen auf dem Gitter wie im Kontinuum einer endlichen zeitlichen Ausdehnung. Damit erhält man die wichtige Relation für die inverse Temperatur β bzw. die Temperatur T :

$$\beta = \frac{1}{T} = aN_t \quad (5.12)$$

Wegen der periodischen Randbedingungen erhält man eichinvariante Größen nicht nur durch geschlossene Schleifen sondern auch durch Linien, die von einem Rand zum anderen laufen. Eine entsprechende Observable ist der sogenannte Polyakov-Loop:

$$L(\mathbf{x}) = \frac{1}{N_c} \text{Sp} \prod_{n_4=0}^{N_t-1} U_4(\mathbf{x}, x_4) \quad (5.13)$$

Hierbei gibt $N_c = 3$ die Anzahl der Farben an.

In [62] wird der Polyakov-Loop mit der freien Energie eines Quarks in Verbindung gesetzt. Um dies zu begründen, verwendet man die quarkfreien Zustände $|s\rangle$ und den Erzeuger $\psi^\dagger(\mathbf{x}, \beta)$ bei (\mathbf{x}, β) . Dann gilt für die Zeitentwicklung:

$$\psi(\mathbf{x}, \beta) = \prod_{n_4=0}^{N_t-1} U_4(\mathbf{x}, x_4) \psi(\mathbf{x}, 0) \quad (5.14)$$

Mit diesen Beziehungen erhält man für die entsprechend normierte freie Energie $F = -T \ln Z$ eines statischen Quarks:

$$\begin{aligned}
e^{-\beta F} &= \frac{1}{N_c} \frac{\sum_s \langle s | \psi(\mathbf{x}, 0) e^{-\beta H} \psi^\dagger(\mathbf{x}, 0) | s \rangle}{\sum_s \langle s | e^{-\beta H} | s \rangle} \\
&= \frac{1}{N_c} \frac{\sum_s \langle s | \psi(\mathbf{x}, \beta) \psi^\dagger(\mathbf{x}, 0) | s \rangle}{\sum_s \langle s | e^{-\beta H} | s \rangle} \\
&= \frac{1}{N_c} \left\langle \text{Sp} \prod_{n_4=0}^{N_t-1} U_4(\mathbf{x}, x_4) \right\rangle = \langle L \rangle
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Wegen der Translationsinvarianz des Gitters in Raumrichtung kann auf die Angabe des Ortsvektors verzichtet werden. Für endliche Gitter ist entsprechend räumlich zu mitteln.

Da die freie Energie einer einzelnen Farbladung in der Confinement-Phase divergiert, signalisiert ein verschwindender Polyakov-Loop gerade Confinement. Das Verhalten des Polyakov-Loops in der reinen Eichtheorie lässt sich ferner in Bezug auf die Zentrums-Symmetrie der Eichwirkung verstehen [62]. Das Zentrum einer Gruppe G ist gegeben durch $C(G) = \{z \in G | \forall g \in G : zgz^{-1} = g\}$; für die $SU(N)$ -Gruppen gilt $C(SU(N)) \cong Z_N$. Während die $SU(3)$ -Eichwirkung invariant unter diesen Transformationen ist, zeigt der Polyakov-Loop folgendes Verhalten:

$$L \rightarrow zL, \quad z \in Z_3 \tag{5.16}$$

Ist die Z_3 -Symmetrie ungebrochen, muss der Polyakov-Loop demzufolge verschwinden, was zum Confinement korrespondiert. Dementsprechend ist in der Deconfinement-Phase die Zentrums-Symmetrie wegen $\langle L \rangle \neq 0$ spontan gebrochen. Für die reine Eichtheorie ist der Polyakov-Loop also ein echter Ordnungsparameter.

In Anwesenheit dynamischer Fermionen verliert der Polyakov-Loop diese Rolle als Ordnungsparameter, da der fermionische Teil der Wirkung nicht invariant unter der Zentrumstransformation ist. Anders ausgedrückt kommt es im Confinement nicht zur Divergenz der freien Energie einer einzelnen Farbladung, da diese durch neue Quark-Antiquark-Paare abgeschirmt wird. Dennoch signalisiert eine große freie Energie, d. h. ein kleiner Wert des Polyakov-Loops, Confinement, wohingegen der Polyakov-Loop im Deconfinement einen größeren Wert annimmt.

5.3.2. Pionnorm

Eine fermionische Observable, die auf den thermischen Übergang sensitiv ist, ist die sogenannte Pionnorm. Dabei handelt es sich eigentlich um einen pseudoskalaren Korrelator; die Bezeichnung Pionnorm ist allerdings üblich und lässt sich bis zu [63] zurückverfolgen. Grundlage sind die pseudoskalaren Dichten P^\pm , die mit $\tau^\pm = \tau^1 \pm i\tau^2$ wie folgt definiert sind:

$$P^\pm(x) = \bar{\psi}(x) \frac{1}{2} \gamma_5 \tau^\pm \psi(x) \tag{5.17}$$

Damit erhält man den Korrelator für verschwindenden Impuls, der als Pionnorm $\|\pi\|^2$ bezeichnet wird:

$$\|\pi\|^2 = \sum_x \langle P^-(x) P^+(0) \rangle = \langle \bar{d}(x) \gamma_5 u(x) \bar{u}(0) \gamma_5 d(0) \rangle \tag{5.18}$$

Die Komponenten u, d des *flavour* Dubletts ψ sind dabei explizit ausgeschrieben. Die so definierte Größe hat den Vorteil, dass sie invariant unter den Basistransformationen (4.2) ist, sodass sich ihre Bedeutung bei Veränderung der Parameter im (κ, μ) -Raum nicht ändert. Als Korrelator sollte die Pionnorm beim thermischen Übergang ein Maximum zeigen. Für echte Phasenübergänge erster oder zweiter Ordnung sollte der Wert dieses Maximums mit wachsendem Volumen divergieren (vgl. Abschnitt 7.1.1).

6. Eigenschaften der tmQCD bei schwacher Kopplung

Eine Möglichkeit, Aussagen über das Verhalten der Gitterregularisierung mit chiral verdrehtem Massenterm zu machen, ist, das Verhalten bei schwacher bzw. verschwindender Kopplung zu untersuchen. In diesem Fall sind die erhaltenen Resultate mit den entsprechenden Ergebnissen aus der Kontinuumsstörungstheorie direkt vergleichbar, sodass sich die Gittereffekte quantifizieren lassen.

Der erste Schritt im direkt folgenden Abschnitt wird die Betrachtung des freien Propagators – noch bei verschwindenden Temperaturen – sein. Danach wird bei endlichen Temperaturen der Druck bei verschwindender Kopplung untersucht, d. h. also der Stefan-Boltzmann-Grenzwert. Abschließend wird die erste Ordnung in der Schwachkopplungsentwicklung behandelt.

6.1. Freier Propagator

Bereits durch die Betrachtung des freien Propagators der tmQCD, der in Gleichung (4.9) bzw. (4.10) angegeben ist, lassen sich Aussagen über Gittereffekte treffen. Ausgangspunkt ist der tmQCD-Propagator Δ_{tm} , in der Formulierung in Abhängigkeit vom Wilson'schen Propagator Δ_{W} :

$$\Delta_{\text{tm}} = \Delta_{\text{W}} \frac{\mathbf{1} - i\mu\gamma_5\tau^3\Delta_{\text{W}}}{1 + \mu^2 |\Delta_{\text{W}}|^2} \quad (6.1)$$

Es sei noch einmal daran erinnert, dass das Betragsquadrat der Operatoren Δ_{tm} und Δ_{W} , da es proportional zum Einsoperator ist, als skalare Größe gelesen werden soll. Mit dieser Konvention bietet sich das inverse Betragsquadrat als interessante Größe an, da es sich als Funktion des Impulses graphisch darstellen lässt. Für den tmQCD-Propagator gilt dann:

$$|\Delta_{\text{tm}}|^{-2} = \left(\Delta_{\text{tm}}\Delta_{\text{tm}}^\dagger\right)^{-1} = |\Delta_{\text{W}}|^{-2} \left(1 + \mu^2 |\Delta_{\text{W}}|^2\right) \quad (6.2)$$

Das Betragsquadrat des inversen Kontinuumspropagators ist $p^2 + M^2$ mit der Gesamtmasse M . In Abbildung 6.1 ist $|\Delta_{\text{tm}}|^{-2}$ für vollen *twist* im Impulsraum für $p = (p_1, p_2, 0, 0)$ in der ersten Brillouin-Zone dargestellt.

Mit dem Kontinuumsverhalten des Wilson-Propagators $|\Delta_{\text{W}}|^{-2} \rightarrow p^2 + m^2$, wobei m die hier endlich gehaltene nicht verdrehte Masse ist, verifiziert man der korrekten Grenzwert des Propagators der tmQCD:

$$|\Delta_{\text{tm}}|^{-2} \rightarrow (p^2 + m^2) \left(1 + \frac{\mu^2}{p^2 + m^2}\right) = p^2 + \underbrace{m^2 + \mu^2}_{M^2} \quad (6.3)$$

Ein Vergleich des Propagators für vollen bzw. keinen *twist* mit dem Kontinuumsverhalten ist in Abbildung 6.2 gezeigt. Dabei ist $p = (p_1, 0, 0, 0)$; für andere Richtungen im Impulsraum ergeben sich keine qualitativen Änderungen. Man erkennt, dass der tmQCD-Propagator mit maximal verdrehter Masse im Bereich kleiner Impulse besser mit dem Kontinuumsverhalten übereinstimmt als für eine nicht verdrehte Masse.

6.1.1. Dispersionsrelation

Aus den Polen des freien Propagators mit $-ip_4 = E$ ergibt sich die freie Dispersionsrelation $E(\mathbf{p})$. Diese lässt sich mit der Kontinuumsbeziehung $E(\mathbf{p}) = \sqrt{p^2 + M^2}$ vergleichen. Aus dem Nenner des Propagators in Gleichung (4.10) erhält man folgende Bestimmungsgleichung für $E(\mathbf{p})$:

$$\sum_{j=1}^3 \sin^2(p_j) - \sinh^2(E) + \left(2 \sum_{j=1}^3 \sin^2\left(\frac{p_j}{2}\right) - 2 \sinh^2\left(\frac{E}{2}\right) + m_0 \right)^2 + \mu^2 = 0 \quad (6.4)$$

Diese implizite Gleichung für E lässt sich numerisch lösen. Für eine Masse $M = 0.5$ ist die Dispersionsrelation in Abbildung 6.3 gezeigt. Insbesondere für kleine Impulse liegt die Dispersionsrelation für die Masse bei vollem *twist* viel näher am Kontinuumswert als diejenige für die nicht verdrehte Masse. Während im Kontinuum $E(0)$ die Masse angibt, weichen die Dispersionsrelationen auf dem Gitter davon ab. Diese Lücke kann also als weitere Größe zur Quantifizierung der Gitterartefakte dienen. Die Definitionsgleichung für $E(0)$ ergibt sich direkt aus Gleichung (6.4):

$$\sinh^2(aE(0)) - \left(am_0 - 2 \sinh^2\left(\frac{aE(0)}{2}\right) \right)^2 - (a\mu)^2 = 0 \quad (6.5)$$

In der obigen Gleichung ist der Gitterabstand a explizit aufgeführt, um zu verdeutlichen, dass man für kleine a entwickeln kann und zu folgender Näherungsformel für $E(0)$ gelangt, solange der Massenparameter nicht zu nah am Cutoff a^{-1} ist:

$$E(0) = M \left(1 - \frac{1}{2} aM \cos(\omega) \right) + \mathcal{O}(a^2) \quad (6.6)$$

Für $\omega = \pi/2$ fallen also die $\mathcal{O}(a)$ -Terme weg. Tatsächlich wird auch klar, dass zumindest im wechselwirkungsfreien Fall die $\mathcal{O}(a)$ -Effekte für $\omega = 0$, d. h. für reine Wilson-Fermionen, am größten sind. In Abbildung 6.4 ist die numerische Lösung für Gleichung (6.5) in Abhängigkeit vom Verdrehungswinkel zusammen mit der Vorhersage aus der Näherungsrechnung aufgetragen. Man erkennt, dass der Abstand zwischen $E(0)$ und dem Wert des Massenparameters für vollen *twist* sehr klein wird. Im Unterfenster der Abbildung ist eine Vergrößerung im Bereich $\omega \approx \pi/2$ gezeigt, um zu verdeutlichen, dass die Übereinstimmung zwischen der Näherungsrechnung und den numerischen Werten wegen höherer Korrekturen im Gitterabstand nicht exakt ist.

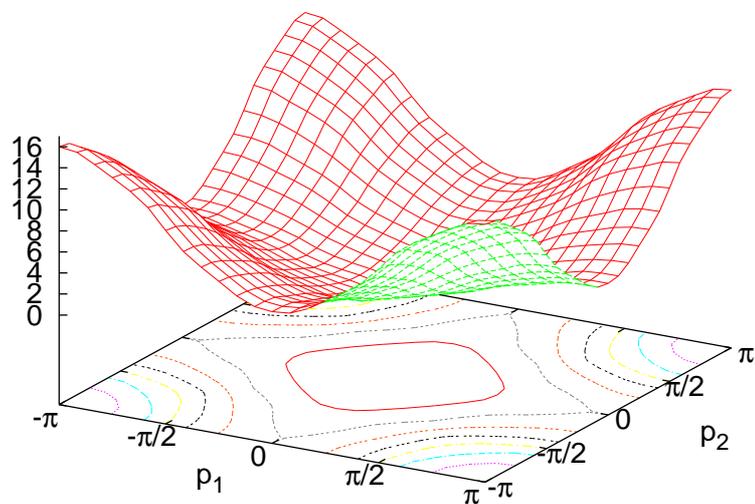


Abbildung 6.1: Inverses Betragsquadrat des tmQCD-Propagators $|\Delta_{\text{tm}}(p)|^{-2}$ bei vollem *twist* und $\mu = 0.005$ in der ersten Brillouin-Zone für $p = (p_1, p_2, 0, 0)$.

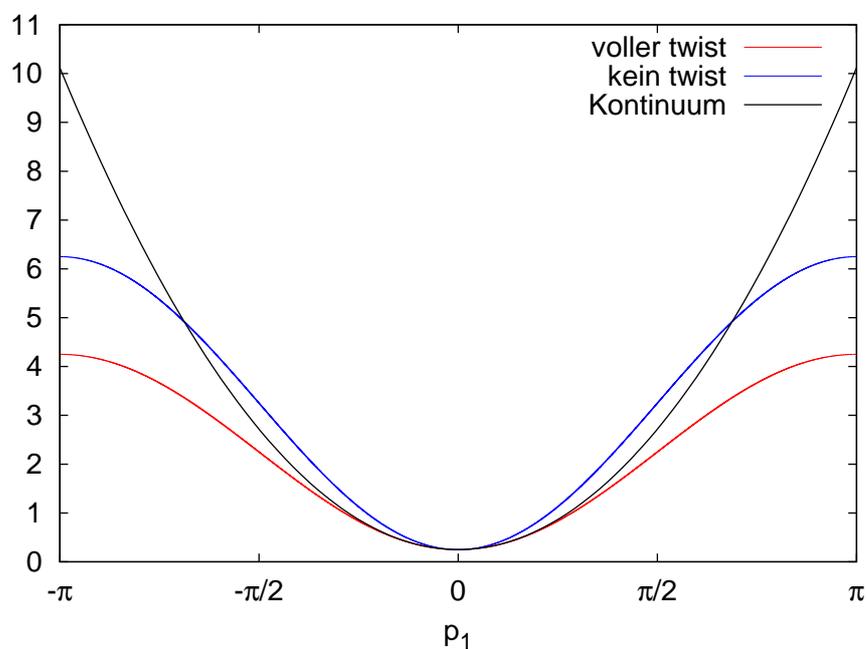


Abbildung 6.2: Vergleich des Verhaltens des Propagators für vollen *twist* und dem Wilson'schen Fall für einen Massenparameter $M=0.5$ für $p = (p_1, 0, 0, 0)$.

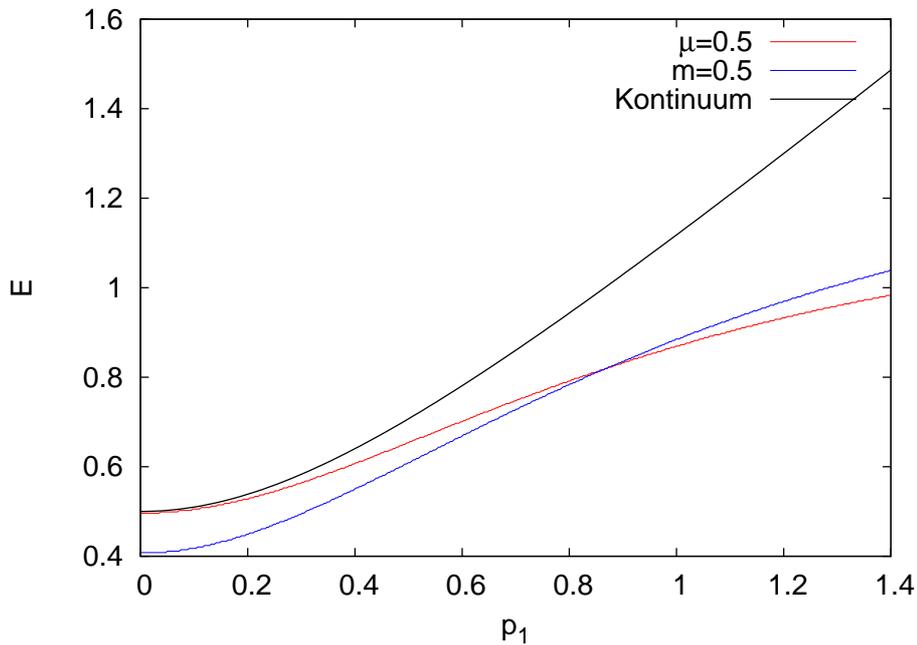


Abbildung 6.3: Dispersionsrelation $E(\mathbf{p})$ für $p = (p_1, 0, 0, 0)$ mit einer Masse $M = 0.5$ bei vollem ($\mu = 0.5$) und keinem ($m = 0.5$) twist.

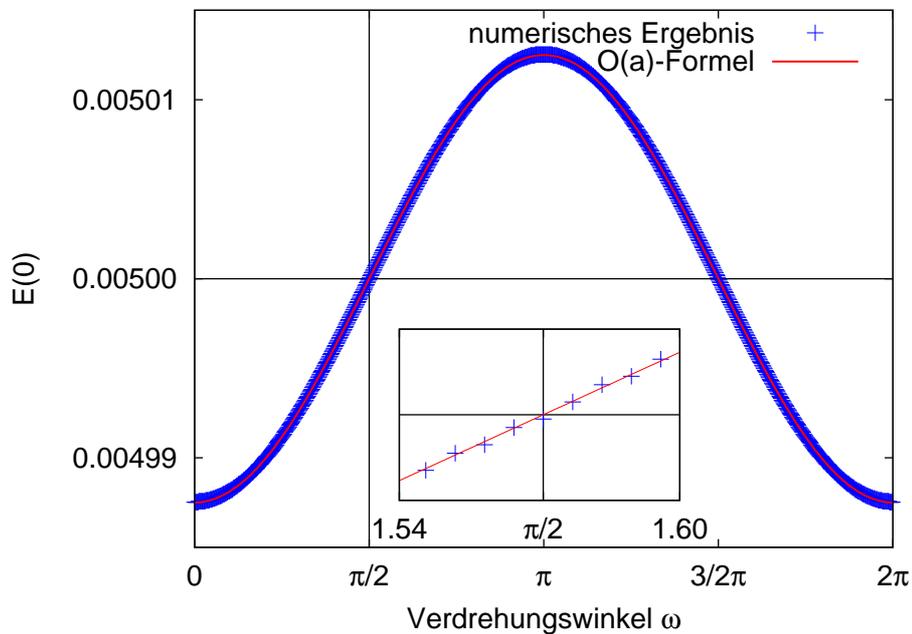


Abbildung 6.4: Vergleich des numerischen Wertes für $E(0)$ mit der Vorhersage aus der Näherungsrechnung (6.6) in Abhängigkeit des Verdrehungswinkels ω bei einer Masse $M = 0.005$. Im Fenster ist eine Vergrößerung im Bereich $\omega \approx \frac{\pi}{2}$ gezeigt.

6.2. Stefan-Boltzmann-Grenzwert

In diesem Abschnitt wird die freie Energiedichte bzw. der Druck ($f = -p$) für eine Reihe von Gitterwirkungen berechnet: auf Seiten der Eichbosonen für die Wilson'sche Wirkung und die verbesserte tISym-Wirkung; für den fermionischen Teil für die freie Wilson-Wirkung sowie für Wirkung der tmQCD. Dabei werden die Resultate jeweils in Bezug zum Kontinuumsergebnis gesetzt, d. h. zum Stefan-Boltzmann-Grenzwert, der sich exakt berechnen lässt. Dieses Vorgehen findet sich auch in [64], wo verbesserte *staggered* Fermionen untersucht wurden.

6.2.1. Freies Gas aus Quarks und Gluonen im Kontinuum

Zur Berechnung des Druckes eines idealen Gases im Kontinuum kann man die Statistische Mechanik verwenden [30, Kap. 4]. Es werden masselose Bosonen (im Hinblick auf die ebenfalls masselosen Eichbosonen) und massive Fermionen betrachtet, wobei man von der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung für die einzelnen Teilchen ausgeht:

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 = \mathbf{p}^2 + m^2 \quad (6.7)$$

Es muss jeweils die Zustandssumme für das gesamte System mit der Hamiltonfunktion $H = \sum_{n,\lambda} n_{\mathbf{p},\lambda} \varepsilon_{\mathbf{p}}$ berechnet werden. Da es keine Wechselwirkungsterme gibt, faktorisiert sie:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta H} = \sum_{\{n_{\mathbf{p},\lambda}\}} e^{-\beta \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},\lambda} \varepsilon_{\mathbf{p}}} = \left(\prod_{\mathbf{p}} \sum_{n_{\mathbf{p}}} e^{-\beta n_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}}} \right)^g \quad (6.8)$$

$g = \sum_{\lambda} 1$ ist der Entartungsgrad für die Energieniveaus – für das Beispiel eines Photons oder Gluons mit zwei Spinfreiheitsgraden ist also $g = 2$.

Die Dichte der freien Energie in einem homogenen System erhält man durch Logarithmieren:

$$f = -p = -\frac{T}{V} \ln Z \quad (6.9)$$

Da die freie Energie $F = -T \ln Z$ eine extensive Größe ist, ist f volumenunabhängig, weshalb der eigentlich notwendige thermodynamische Limes ($V \rightarrow \infty$) bereits in (6.9) enthalten ist.

Für Bosonen können die Besetzungszahlen $n_{\mathbf{p}}$ beliebige Werte aus \mathbb{N} annehmen. In Gleichung (6.8) erhält man somit eine geometrische Reihe:

$$Z_G = \left(\prod_{\mathbf{p}} \frac{1}{1 - e^{-\varepsilon_{\mathbf{p}}/T}} \right)^g \quad (6.10)$$

Wenn man nun den Logarithmus bildet und dabei von der Summe über diskrete \mathbf{p} zum Integral übergeht, so erhält man:

$$f_G = gT \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \ln \left(1 - e^{-\varepsilon_{\mathbf{p}}/T} \right) \quad (6.11)$$

Dieses Integral kann im masselosen Fall, d. h. für $\varepsilon_{\mathbf{p}} = \|\mathbf{p}\|$ exakt gelöst werden:

$$f_G = -gT^4 \frac{\pi^2}{90} \quad (6.12)$$

Damit ergibt sich auch die Form, in der das Stefan-Boltzmann-Gesetz üblicherweise angegeben wird:

$$\frac{p_{G,SB}}{T^4} = g \frac{\pi^2}{90} \quad (6.13)$$

Die $SU(3)_F$ der QCD besitzt acht Generatoren, d. h. man hat acht Gluonen mit jeweils zwei Spinfreiheitsgraden. Insgesamt ist also $g = 16$.

Da die Fermionen dem Pauliprinzip genügen müssen, nehmen die Besetzungszahlen hier nur die Werte 0 und 1 an. Damit ergibt sich aus Gleichung (6.8):

$$Z_F = \left(\prod_{\mathbf{p}} \left(1 + e^{-\varepsilon_{\mathbf{p}}/T} \right) \right)^g \quad (6.14)$$

Für die Dichte der freien Energie gilt somit:

$$\begin{aligned} f_F &= -gT \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \ln \left(1 + e^{-\varepsilon_{\mathbf{p}}/T} \right) \\ &= -\frac{gT^4}{2\pi^2} \int_{m/T}^{\infty} dx x \sqrt{x^2 - \left(\frac{m}{T}\right)^2} \ln(1 + e^{-x}) \end{aligned} \quad (6.15)$$

Das obige Integral lässt sich nur für den Fall $m = 0$ exakt lösen. Man erhält dann:

$$f_F(m = 0) = -g \frac{7}{8} \frac{\pi^2}{90} \quad (6.16)$$

Für die n_f Quarks der QCD zählt man zwei Spin- und drei Farbfreiheitsgrade. Außerdem taucht noch ein weiterer Faktor 2 wegen der Teilchen-Antiteilchen-Entartung auf, sodass insgesamt gilt:

$$g = n_f \cdot 2 \cdot 3 \cdot 2 = 12n_f \quad (6.17)$$

Für den Druck eines masselosen Quarkgases hat man also folgenden Stefan-Boltzmann-Wert:

$$\frac{p_{F,SB}}{T^4} = \frac{21}{2} n_f \frac{\pi^2}{90} \quad (6.18)$$

Für massive Fermionen definiert man folgende Funktion (vgl. auch [64]):

$$g\left(\frac{m}{T}\right) = \frac{360}{7\pi^4} \int_{m/T}^{\infty} dx x \sqrt{x^2 - \left(\frac{m}{T}\right)^2} \ln(1 + e^{-x}) \quad (6.19)$$

Dann ist $g(0) = 1$ und man kann $\sum_f g(m_f/T)$ in dem Sinne als effektive *flavour* Anzahl ansehen, als dass für masselose Teilchen $\sum_f g(0) = n_f$ gilt. Für den Druck gilt somit (vgl. Abb. 6.5):

$$\frac{p_{F,SB}}{T^4} = \frac{21}{2} \sum_f g(m_f/T) \frac{\pi^2}{90} \quad (6.20)$$

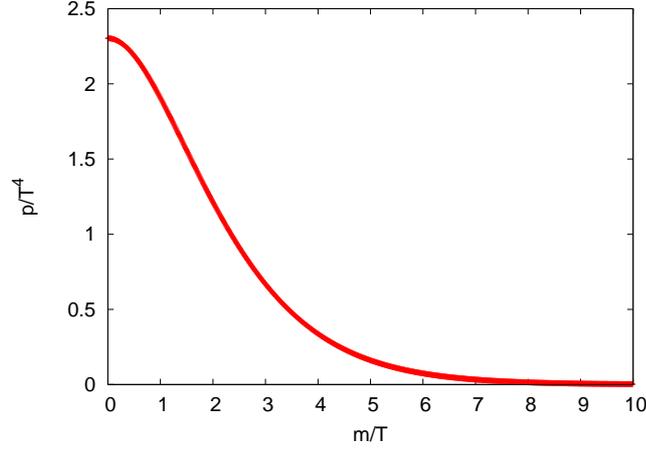


Abbildung 6.5: Druck für massive Fermionen in Abhängigkeit von m/T für $n_f = 2$

6.2.2. Freies Gas aus Quarks und Gluonen auf dem Gitter

Die Berechnung des Druckes für die einzelnen Gitterwirkungen erfolgt auf einem Gitter mit unendlicher Ausdehnung in die drei Raumrichtungen und einem isotropen Gitterabstand a für alle Richtungen. Die freie Zustandssumme für ein Gas aus Fermionen und Eichbosonen lautet dann:

$$Z = \int \left(\prod_{x,\mu} dU_{x,\mu} \right) \int \left(\prod_x d\psi(x) d\bar{\psi}(x) \right) e^{-S_F - S_G} \quad (6.21)$$

Die Normierung wird konventionsgemäß so gewählt, dass für verschwindende Temperatur auch der Druck bzw. die freie Energie verschwindet. Da diese Größen durch den Logarithmus der Zustandssumme gegeben sind, bedeutet dies, dass jeweils der Beitrag, den man für eine unendliche Ausdehnung in Zeitrichtung erhält, abgezogen werden muss. Damit ist es sinnvoll, die folgende Abkürzung zu verwenden:

$$\int_p f(p) = \int_{[0,2\pi)^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} f(\mathbf{p}, -\omega_n) - \int_{[0,2\pi)^4} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} f(\mathbf{p}, p_4) \quad (6.22)$$

Für ein endliches Volumen mit N_s Gitterplätzen in jede Raumrichtung ersetzt man lediglich die Impulsintegration durch endliche Summen:

$$\int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \rightarrow \frac{1}{N_s} \sum_{n=1}^{N_s} \quad (6.23)$$

Ohne Wechselwirkungen faktorisiert Z und man kann die Anteile von Fermionen und Eichbosonen am Gesamtdruck getrennt berechnen. Für die Fermionen gilt bei entsprechender Normierung:

$$p_F = \frac{T}{V} \ln \text{Det} M \quad (6.24)$$

Dabei ist $M = \Delta^{-1}$ die (freie) Fermionmatrix für die jeweils gewählte Gitterwirkung.

Der Propagator für die Wilson-Fermionwirkung ist in Gleichung (3.8) angegeben. Für die weitere Rechnung wird $r = 1$ gesetzt. Bei der Wirkung der tmQCD hat man die Fermionmatrix $M_{\text{tm}} = M_{\text{W}} + i\mu\gamma_5\tau^3$. Die *flavour* Determinante lässt sich direkt angeben:

$$\text{Det}_f M_{\text{tm}} = M_{\text{W}} M_{\text{W}}^\dagger + \mu^2 \quad (6.25)$$

Im Folgenden können die reinen Wilson-Fermionen als Spezialfall der tmQCD mit verschwindendem Verdrehungswinkel $\omega = 0$ behandelt werden. *Staggered* Fermionen fallen im wechselwirkungsfreien Fall mit den naiven Fermionen, die man für verschwindenden Wilsonparameter $r = 0$ zurückerhält, zusammen, wenn man die durch die Doppler erhöhte *flavour* Zahl berücksichtigt. Deshalb können auch die Fermionen vom *staggered* Typ recht einfach zum Vergleich herangezogen werden.

In der vorhergehenden Gleichung lässt sich der Einheitsoperator im Farbraum sofort auswerten und man erhält einen Faktor $N_{\text{Farbe}} = 3$. Für den Teil nichtverschwindender Temperatur ergibt sich folglich:

$$\frac{3}{\beta V} \cdot V\beta \int_{[0,2\pi]^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{N_t} \sum_{n=0}^{N_t-1} \ln \text{Det} \left(|G(\mathbf{k}, \omega_n)|^2 + \mu^2 \right) \quad (6.26)$$

Dabei gibt $G(k)$ den impulsabhängigen Teil der Wilson'schen Fermionmatrix an, d. h. $M_{\text{W}} = G(k) \otimes \mathbf{1}_f \otimes \mathbf{1}_F$. Das Betragsquadrat von G ist proportional zum Einheitsoperator und soll folglich wie schon in vorangegangenen Fällen als Skalar zu verstehen sein.

$$G(k) = m + 2r \sum_{\mu=1}^4 \sin^2 \left(\frac{k_\mu}{2} \right) + i \sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \sin(k_\mu) \quad (6.27)$$

Die wie üblich in der Notation unterdrückten Gitterkonstanten a können durch eine Substitution ($ap \rightarrow p$) aus dem Integral entfernt werden. Über den Zusammenhang $T^{-1} = aN_t$ gelangt man dann zu einer numerisch auswertbaren Form:

$$\frac{p_{\text{F}}}{T^4} = 12N_t^4 \int_k \ln \left(|G(k)|^2 + \mu^2 \right) \quad (6.28)$$

Entwickelt man $|G(k)|^2$ in der Gitterkonstanten a , so erhält man:

$$|G(k)|^2 \approx k^2 + a^2 \left(m^2 + mk^2 + \frac{1}{4}k^4 \right) + \mathcal{O}(a^3) \quad (6.29)$$

Damit stehen im Logarithmus nur Terme der Ordnung $\mathcal{O}(a^0)$, $\mathcal{O}(a^2)$ und höher. Es ist also klar, dass der freie Druck keinen Beitrag der $\mathcal{O}(a)$ aufweist und die automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung der Formulierung bei maximaler chiraler Verdrehung nicht zum Tragen kommen kann. Diese Observable in der wechselwirkungsfreien Theorie ist damit allerdings dazu geeignet, die $\mathcal{O}(a^2)$ -Effekte bei verschiedenen Verdrehungswinkeln zu vergleichen.

Bei den Eichbosonen ergibt sich die zusätzliche Komplikation, dass nur zwei von vier Freiheitsgraden physikalisch sind. Deshalb muss eine Eichfixierung vorgenommen werden, sodass die Spur in der Zustandssumme $Z = \text{Sp} e^{-\beta H}$ tatsächlich nur über physikalische Freiheitsgrade läuft (vgl. [65]). Dies kann in kovarianter Weise entsprechend der Prozedur von Faddeev und Popov geschehen (vgl. Abschnitt 2.4.2). Dann allerdings

entkoppeln die einzuführenden Geistfelder nicht von den physikalischen Freiheitsgraden. Insbesondere ist ihr Beitrag temperaturabhängig, sodass er selbst im wechselwirkungsfreien Fall berücksichtigt werden muss, um physikalisch sinnvolle Resultate zu erhalten [31, Kap. 8.1].

Für die Wilson'sche Eichwirkung ist der Propagator in Gleichung (3.13) angegeben. Im Folgenden wird stets die Feynman-Eichung $\xi = 1$ benutzt. Der Gluonpropagator in Feynman-Eichung und der Geistpropagator zeigen dieselbe Impulsabhängigkeit:

$$\Delta_{\text{G},\mu\nu}^{rs}(p) = \hat{p}^{-2} \delta_{\mu\nu} \delta_{rs} \quad \text{und} \quad \Delta_{\text{Geist}}^{rs} = \hat{p}^{-2} \delta_{rs} \quad (6.30)$$

Um den Druck zu berechnen, muss ein Ausdruck von folgender Form ausgewertet werden:

$$\ln Z_{\text{G}} + \ln Z_{\text{Geist}} = \frac{1}{2} \ln \text{Det} \Delta_{\text{G}} - \ln \text{Det} \Delta_{\text{Geist}} \quad (6.31)$$

Der Faktor $\frac{1}{2}$ kommt aus der Gauß'schen Integration, das Minuszeichen rührt von der Grassmann-Integration her und durch die diagonale Lorentz-Struktur des Eichanteils kommt noch ein zusätzlicher Faktor 4 ins Spiel. Alles in allem erhält man damit:

$$\ln Z_{\text{G}} + \ln Z_{\text{Geist}} = - \int_p \ln \hat{p}^2 \quad (6.32)$$

Dies ist gerade die Hälfte des Ergebnisses, dass man ohne die Berücksichtigung der Geistfelder erhalten hätte. Insofern kann man davon sprechen, dass die Geistfelder als zwei negative Freiheitsgrade die nichtphysikalischen Freiheitsgrade aufheben.

Insgesamt folgt so für den Druck mit der Wilson'schen Wirkung ($\omega_n = \frac{2\pi n}{N_t}$):

$$\frac{p_{\text{G}}}{T^4} = -8N_t^4 \int_k \ln \left(4 \sum_{\mu=1}^4 \sin^2(k_\mu/2) \right) \quad (6.33)$$

Die tISym-Wirkung ist gegenüber der Wilson'schen Eichwirkung um Beiträge rechteckiger Schleifen ergänzt. Der Eichpropagator ist in Gleichung (3.14) angegeben, während die Form des Geistpropagators unverändert bleibt. Da die beiden Propagatoren eine unterschiedliche Impulsabhängigkeit aufweisen, kommt es durch die Einführung der Geistfelder nicht mehr zu der einfachen Halbierung des Druckes wie bei der Wilson'schen Eichwirkung. Insgesamt gilt es, folgende Formel auszuwerten:

$$\frac{p_{\text{G}}}{T^4} = -4N_t^4 \int_k \left(\ln (\text{Det} \Delta_{\mu\nu}^{-1}(k)) - 2 \ln \left(4 \sum_{\mu=1}^4 \sin^2(k_\mu/2) \right) \right) \quad (6.34)$$

Die Auswertung der Determinante über den tISym-Propagator geschieht sinnvollerweise automatisiert durch ein geeignetes Mathematikprogramm.¹

6.2.3. Masselose Teilchen im SB-Grenzwert

Zunächst wird der Druck eines Gases masseloser Teilchen im Stefan-Boltzmann-Grenzwert betrachtet. Dabei hat man zum einen die Eichbosonen mit der Wilson'schen bzw. der tISym-Wirkung, zum anderen masselose Fermionen, wobei dann die Wilson'sche und

¹In dieser Arbeit wurde *Mathematica* 5.2 verwendet; Copyright: Wolfram Research, Inc.

die chiral verdrehte Formulierung zusammenfallen. Außerdem werden naive Fermionen betrachtet, die in diesem Fall das Verhalten der *staggered* Fermionen widerspiegeln. Die Ergebnisse für den Druck, der auf den jeweiligen Stefan-Boltzmann-Grenzwert aus den Gleichungen (6.16) bzw. (6.13) (mit $g = 16$) normiert ist, sind in Abbildung 6.6 zu sehen. Da bei unendlichem räumlichen Volumen die zeitliche Gitterausdehnung die einzige verfügbare Skala ist, entspricht der Grenzwert $N_t \rightarrow \infty$ dem Kontinuumslimit. Um dies zu begründen, betrachtet man die Bestimmungsgleichung für die Temperatur:

$$T = \frac{1}{aN_t} \quad (6.35)$$

Sollen also die physikalischen Bedingungen fixiert werden, so muss mit $a \rightarrow 0$ notwendig $N_t \rightarrow \infty$ gelten.

In der nachfolgenden Tabelle sind die Ergebnisse für masselose Teilchen nochmals zusammengestellt.² Die Ergebnisse für die tlSym-Wirkung bei $N_t = 4, 6, 8, 10$ wurden auch schon in [64] angegeben. Dort findet man außerdem Ergebnisse zu verbesserten *staggered* Fermionwirkungen. Die hier erhaltenen Werte für naive bzw. *staggered* Fermionen sind eine Reproduktion des entsprechenden Diagramms in [43]. Man erkennt, dass *staggered* Fermionen bei kleineren N_t nicht so stark vom Kontinuumswert abweichen wie Wilson'sche Fermionen. Allerdings nähern sich die beiden Diskretisierungen in ihrem Verhalten an, sodass für $N_t = 10$ beide bei etwa 1.24 liegen.

N_t	p/p_{SB}			
	Plakette	tlSym-Wirkung	Wilson'sche Fermionen	naive Fermionen
4	1.3777937(1)	0.928(01)	3.8281(01)	2.14062(6)
5	1.2129964(1)	0.977(02)	2.8014(01)	
6	1.1323319(1)	0.992(04)	2.1154(03)	1.7712(3)
7	1.0903105(1)	0.997(07)	1.7040(05)	
8	1.0660961(1)	0.998(11)	1.4641(08)	1.422(1)
9	1.0508985(1)	0.998(18)	1.3231(13)	
10	1.0405581(1)	0.998(28)	1.2363(20)	1.238(3)

6.2.4. Massive Teilchen im SB-Grenzwert

Um das Verhalten massiver Fermionen im Kontinuumslimit zu betrachten, muss man die zwei zur Verfügung stehenden Parameter, die zeitliche Ausdehnung N_t und den Massenparameter M , so verändern, dass die physikalischen Bedingungen, d. h. die Temperatur T und die Masse m erhalten bleiben. Zur Fixierung dient der Quotient aus Masse und Temperatur:

$$\frac{m}{T} = (aM)N_t \quad (6.36)$$

Dabei ist aM der dimensionslose Massenparameter, der ansonsten wegen der Konvention $a = 1$ selbst als M bezeichnet wird. Um also m/T konstant zu halten, muss mit wachsendem N_t aM immer kleiner werden. Bei der Normierung des Drucks auf den Stefan-Boltzmann-Grenzwert – Gleichung (6.20) – muss die endliche Masse ebenfalls

²Die numerische Integration wurde mit der Routine D01FCF der Fortran-Bibliothek der *Numerical Algorithms Group* (Mark 20) durchgeführt; zur Kontrolle diente D01GBF.

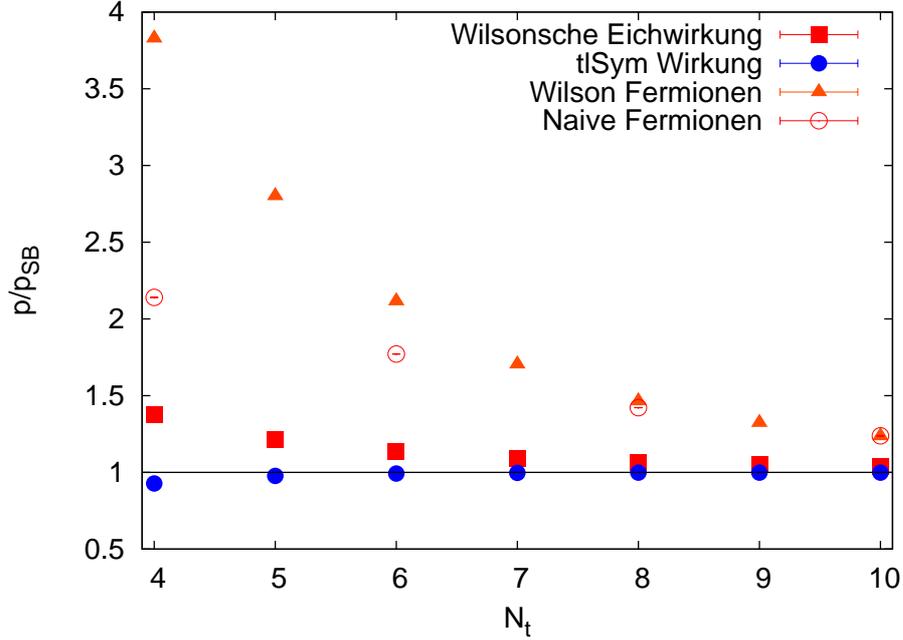


Abbildung 6.6: Verhalten des Druckes, normiert auf den jeweiligen Stefan-Boltzmann-Grenzwert, für masselose Teilchen im Kontinuumslimit $N_t \rightarrow \infty$.

berücksichtigt werden. Das Ergebnis für zwei verschiedene Werte von m/T für tmQCD-Fermionen bei vollem *twist* verglichen mit reinen Wilson-Fermionen ist in Abbildung 6.7 gezeigt und in der nachfolgenden Tabelle zusammengefasst.³ Man erkennt insbesondere bei dem größeren Wert von m/T und kleinen N_t , dass die ursprüngliche Wilson'sche Formulierung sogar etwas kleinere Gitterartefakte aufweist. Insgesamt verhalten sich die beiden Diskretisierungen jedoch in derselben Art und Weise.

N_t	$p/p_{\text{SB}}(m/T)$			
	ohne <i>twist</i>		voller <i>twist</i>	
	$m/T = 0.02$	$m/T = 0.2$	$m/T = 0.02$	$m/T = 0.2$
4	3.81663(8)	3.73610(8)	3.82834(8)	3.84902(8)
5	2.7944(2)	2.7462(2)	2.8015(2)	2.8146(2)
6	2.1115(4)	2.0845(4)	2.1156(4)	2.1236(4)
7	1.7018(7)	1.6870(7)	1.7041(7)	1.7091(7)
8	1.463(2)	1.455(2)	1.464(2)	1.468(2)
9	1.322(2)	1.318(2)	1.323(2)	1.325(2)
10	1.236(3)	1.234(3)	1.237(3)	1.238(3)

Es sei nochmals auf das Ergebnis des vorangegangenen Abschnitts 6.2.2 hingewiesen, dass der freie Druck keine $\mathcal{O}(a)$ -Effekte aufweist und hier somit Effekte höherer Ordnung betrachtet werden. In Abbildung 6.8 ist der Wert des Druckes normiert auf den Stefan-Boltzmann Wert bei $m/T = 0.02$ und $N_t = 8$ in Abhängigkeit von ω gezeigt. Hier erkennt man, dass die Gittereffekte bei verschwindendem *twist* minimal sind und

³Die numerische Integration wurde wiederum mit der Routine D01FCF der Fortran-Bibliothek der *Numerical Algorithms Group* (Mark 20) durchgeführt; zur Kontrolle diente ebenfalls D01GBF

für $\omega = \pi$, d.h. bei $\mu = 0$ und einer nicht verdrehten Masse, die mit der negativen Gesamtmasse übereinstimmt, die Abweichung vom Kontinuum am größten ist. Dass die chiral verdrehte Formulierung größere $\mathcal{O}(a^2)$ -Effekte aufweist als die Wilson'sche, ist nicht überraschend, was insbesondere mit dem expliziten Bruch der Paritäts-*flavour*-Symmetrie zusammenhängt (vgl. Abschnitt 4.2.2). Wichtig ist aber auch anzumerken, dass das Beispiel zeigt, dass der Unterschied zwischen den verschiedenen Verdrehungswinkeln mit schlimmstenfalls 0,4% recht klein ist.

Eine weitere Möglichkeit Gittereffekte aufzuzeigen, ist, für ein festes N_t den Massenparameter zu variieren. Dies entspricht zwar nicht physikalisch fixierten Bedingungen, aber wenn alle Werte des Druckes auf den Kontinuums Grenzwert mit dem entsprechenden m/T normiert werden, so kann man mit wachsendem Massenparameter, der sich immer mehr dem Cutoff a^{-1} nähert, das Anwachsen der Gitterartefakte sehen. Ein entsprechendes Diagramm ist in Abbildung 6.9 dargestellt, wo Unterschiede zwischen maximaler Verdrehung und reinen Wilson'schen Fermionen erkennbar sind. Es treten Wertebereiche auf, in denen die Wilson-Formulierung zu leicht niedrigeren Gittereffekten führt, was zu der vorhergehenden Beobachtung aus Abbildung 6.7 passt.

Letztlich kann man noch das Verhalten im thermodynamischen Limes ($V \rightarrow \infty$) betrachten, der hier für ein endliches Raumvolumen durch $N_s \rightarrow \infty$ erreicht wird. Abbildung 6.10 verdeutlicht für einen festen Wert von m/T und festes $N_t = 8$, dass das Verhalten für $tmQCD$ -Fermionen bei vollem bzw. keinem *twist* praktisch übereinstimmt.

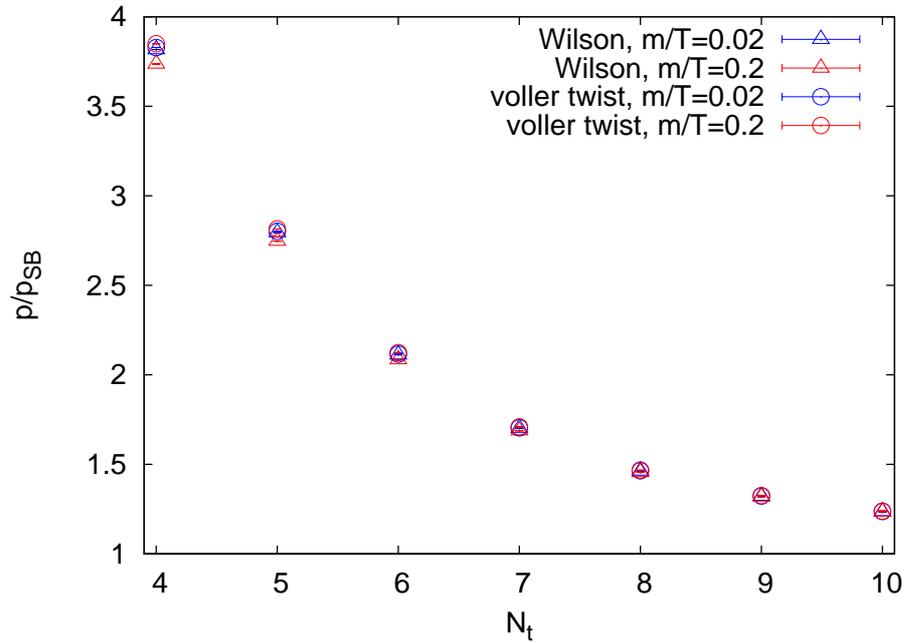


Abbildung 6.7: Verhalten des Druckes, normiert auf den jeweiligen Stefan-Boltzmann-Grenzwert, für massive Fermionen im Kontinuumslimit $N_t \rightarrow \infty$ und $m/T = \text{konstant}$.

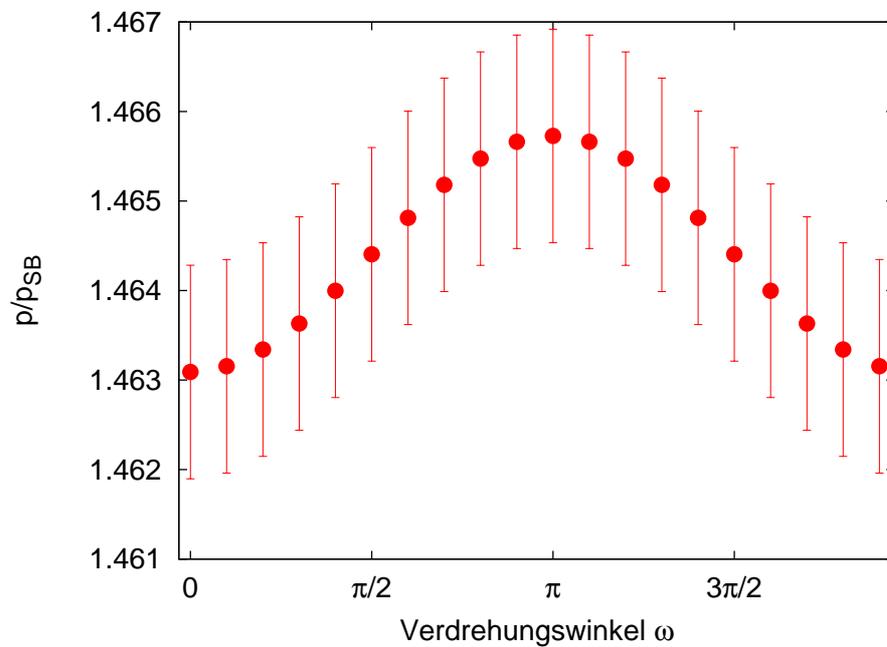


Abbildung 6.8: Verhalten des Druckes, normiert auf den Stefan-Boltzmann-Grenzwert, für massive Fermionen mit $m/T = 0.02$ in Abhängigkeit des Verdrehungswinkels ω .

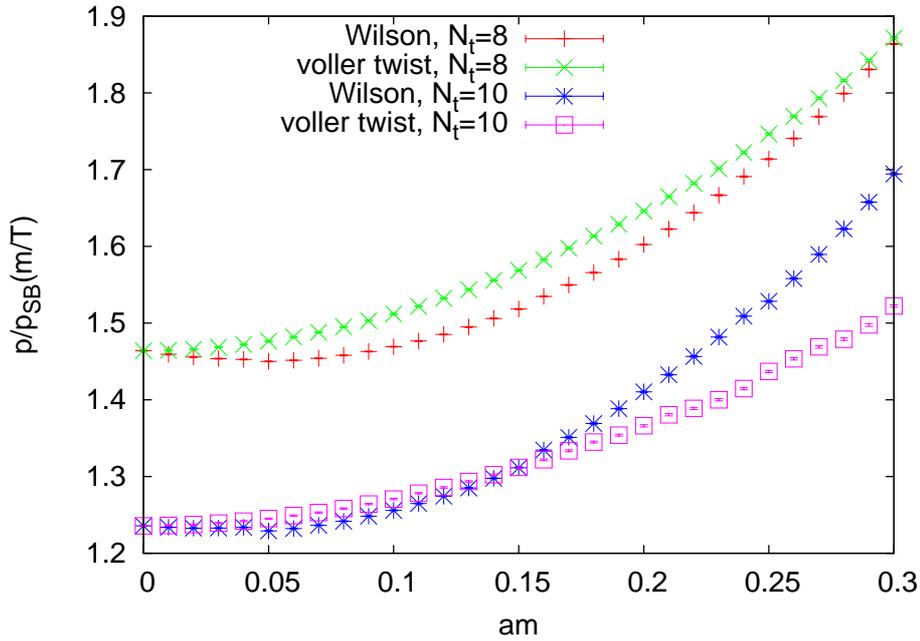


Abbildung 6.9: Verhalten des Druckes, normiert auf den jeweiligen massenabhängigen Stefan-Boltzmann-Grenzwert, für wachsenden Massenparameter bei $N_t = 8, 10$.

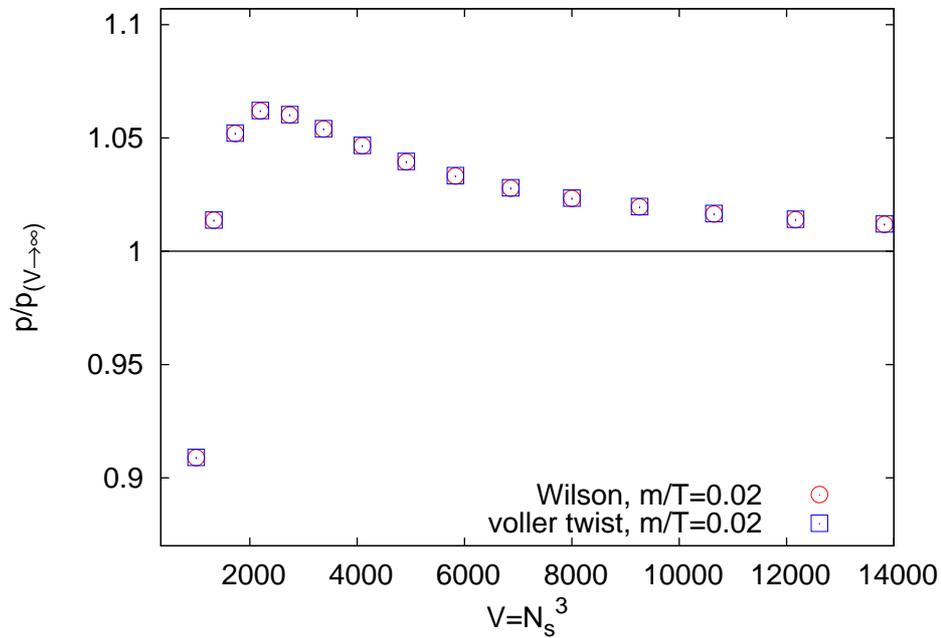


Abbildung 6.10: Verhalten des Druckes, normiert auf den entsprechenden Wert für unendliches räumliches Volumen, im thermodynamischen Limes $V = (aN_s)^3 \rightarrow \infty$ für Wilson'sche bzw. maximal chiral verdrehte Fermionen mit $m/T = 0.02$ auf einem Gitter mit $N_t = 8$.

6.3. Korrektur zum Druck in erster Ordnung

Die erste Korrektur zum Druck eines wechselwirkungsfreien Gases in der Schwachkopp-
 lungsentwicklung der QCD ergibt sich in $\mathcal{O}(g^2)$. Hierfür muss der Logarithmus der
 Zustandssumme $Z = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, U] \exp(-S_0 - gS_1 - g^2S_2 - \dots)$ entwickelt werden:

$$p = \frac{1}{\beta V} \ln Z = p_{\text{SB}} + g^2 \left(\frac{1}{2} \langle S_1^2 \rangle_0 + \langle -S_2 \rangle_0 \right) + \dots \quad (6.37)$$

Diese Korrektur wurde in [66] berechnet, wobei dort der fermionische Anteil und der
 reine Eichsektor getrennt behandelt wurden. Da hier das Ziel in einer Bestimmung der
 Diskretisierungseffekte der tmQCD besteht, wird das Augenmerk im Folgenden auf dem
 fermionischen Teil liegen. Aus [66] bzw. [31, Kap. 5.5.1] erhält man die folgende Formel:

$$\begin{aligned} \frac{p_{\text{F}}^{(2)}}{T^4} = & -\frac{4}{3} n_f g^2 \frac{1}{T^2} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{N_F(p)}{E_p} \\ & - \frac{8n_f}{T^4} g^2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{N_F(p)N_F(q)}{E_p E_q} \\ & \cdot \left(1 + \frac{m^2}{(E_p - E_q)^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2} + \frac{m^2}{(E_p + E_q)^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2} \right) \end{aligned} \quad (6.38)$$

Dabei werden die Abkürzungen $N_F(p) = (\exp(\beta E_p) + 1)^{-1}$ für die Besetzungszahl und
 $E_p = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ für die Energie benutzt. Gegenüber der in [31, 66] angegebenen Formel⁴
 wurde von vornherein der in dieser Arbeit relevante Fall verschwindenden chemischen
 Potentials betrachtet.

Für $n_f = 2$ masselose Fermionen gilt [31, Kap. 5.5.1]:

$$\frac{p_{\text{F}}^{(2)}}{T^4} = -\frac{5}{36} g^2 \approx -0.138889 g^2 \quad (6.39)$$

Für massive Fermionen muss man die Impulsintegration numerisch ausführen. Durch
 die Substitution $p \rightarrow x = p/T$ hängt das Ergebnis nur noch von einem Parameter,
 m/T , ab. Die Ergebnisse für vier Werte von m/T sind in der nachfolgenden Tabelle
 zusammengefasst.

m/T	$\frac{p_{\text{F}}^{(2)}}{T^4} (n_f = 2)$
0.	$-0.13887(1)g^2$
0.005	$-0.13887(1)g^2$
0.01	$-0.13885(1)g^2$
0.1	$-0.13708(1)g^2$

6.3.1. Störungstheorie für gitterregularisierte tmQCD

Die Wirkung der tmQCD stimmt mit derjenigen für Wilson'sche Fermionen bis auf den
 chiral verdrehten Massenterm überein. Da der Massenterm nur in den Propagator ein-
 geht, bleiben also die Wechselwirkungsvertizes der tmQCD gegenüber der Wilson'schen

⁴In [31] wird die entsprechende Druckkorrektur in der QED angegeben. Das QCD Ergebnis erhält man
 durch die Ersetzung der Kopplung $e^2 \rightarrow 4g^2$; vgl. das dortige Kapitel 8.3.

Formulierung unmodifiziert. Sie können [42, S. 138] entnommen werden. Der tmQCD-Propagator wurde bereits in Gleichung (4.9) bzw. (4.10) angegeben. Für die Berechnung der fermionischen Druckkorrektur in $\mathcal{O}(g^2)$ sind zwei Vertizes zu berücksichtigen:

$$(V_1)_\mu^{r,ab} = -g(T^r)^{ab} \left(i\gamma_\mu \cos\left(\frac{(p_1 + p_2)_\mu}{2}\right) + \sin\left(\frac{(p_1 + p_2)_\mu}{2}\right) \right) \quad (6.40)$$

$$(V_2)_{\mu\nu}^{rs,ab} = -\frac{1}{2}g^2\delta_{\mu\nu} \left(\frac{\delta^{rs}}{N_c} + d^{rst}T^t \right)^{ab} \left(-i\gamma_\mu \sin\left(\frac{(p_1 + p_2)_\mu}{2}\right) + \cos\left(\frac{(p_1 + p_2)_\mu}{2}\right) \right) \quad (6.41)$$

V_1 beschreibt den Quark-Quark-Gluon-Vertex, während V_2 zum 2-Quark-2-Gluon-Vertex gehört. Daraus ergeben sich die folgenden zwei Feynman-Diagramme:

$$p_{F(A)}^{(2)} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\beta V} \text{ (Diagramm: Kreis mit Wellenlinie) } \quad p_{F(B)}^{(2)} = \frac{1}{\beta V} \text{ (Diagramm: Kreis mit Blume) } \quad (6.42)$$

Die Wahl einer spezifischen Eichwirkung hat zwar keinen Einfluss auf die Quark-Gluon Vertizes; jedoch wird der Eichpropagator durch die Form der Wirkung bestimmt. Für die hier gemachten Störungsrechnungen ist als einfachste Möglichkeit die Wilson'sche Eichwirkung verwendet worden. Dadurch werden gegenüber verbesserten Eichwirkungen, wie etwa der tISym-Wirkung, sicherlich zusätzliche Gitterartefakte eingeführt. Die vorangegangene Betrachtung des Stefan-Boltzmann-Grenzwertes, vgl. Abbildung 6.6, legt allerdings nahe, dass sich diese zusätzlichen Diskretisierungsfehler in einem kontrollierbaren Rahmen bewegen. Diese Annahme wird untermauert durch die Ergebnisse aus [43, Fig. 5], wo die $\mathcal{O}(g^2)$ -Korrektur für Fermionen vom *staggered* Typ mit den beiden Eichwirkungen berechnet wird und die korrespondierenden Datenpunkte jeweils nahe beieinander liegen.

Mit der Wilson'schen Eichwirkung führen die beiden fermionischen Diagramme auf die folgenden Impulsintegrale, die numerisch berechnet werden müssen, wobei die auf dem Gitter endlichen Matsubara-Summen explizit ausgeführt werden:

$$\begin{aligned} \frac{p_{F(A)}^{(2)}}{T^4} &= -\frac{T}{2VT^4} \text{Sp} \Delta_{\text{tm}}(p)V_1(p,k)\Delta_{\text{tm}}(k)V_1(k,p)\Delta_G(p-k) \\ &= 16g^2 N_t^4 \int_{p,q} \frac{1}{\tilde{q}^2} \frac{K(p,p-q) + 4\mu^2}{(\vec{p}^2 + M^2(p) + \mu^2)(\vec{p}-\vec{q}^2 + M^2(p-q) + \mu^2)} \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$\begin{aligned} \frac{p_{F(B)}^{(2)}}{T^4} &= -\frac{T}{2VT^4} \text{Sp} \Delta_{\text{tm}}(p)V_2\Delta_G(q) \\ &= 16g^2 N_t^4 \int_{p,q} \frac{1}{\tilde{q}^2} \frac{\sum_\nu \cos(p_\nu)M(p) - \vec{p}^2}{\vec{p}^2 + M^2(p) + \mu^2} \end{aligned} \quad (6.44)$$

Dabei sind $K(p,k) = \sum_\nu ((c_\nu - s_\nu)M(p)M(k) - 4c_\nu s_\nu M(p)\bar{k}_\nu - 2c_\nu^2 \bar{k}_\nu \bar{p}_\nu) + 4\vec{p} \cdot \vec{k}$, $M(p) = m + \hat{p}^2/2$, $c_\nu = \cos\left(\frac{(p+k)_\nu}{2}\right)$ und $s_\nu = \sin\left(\frac{(p+k)_\nu}{2}\right)$.

Wegen des linearen Auftretens des für die Wilson'schen Fermionen typischen impulsabhängigen Massenterms $M(p)$ in den obigen Integralen, kann die $\mathcal{O}(g^2)$ -Korrektur zum Druck anders als der zuvor berechnete Beitrag in $\mathcal{O}(g^0)$ durchaus Diskretisierungsfehler

in $\mathcal{O}(a)$ aufweisen. Diese können allerdings nur über den in $M(p)$ enthaltenen nicht verdrehten Massenterm m eingeführt werden, wodurch die automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung für maximale Verdrehung, d. h. $m = 0$, deutlich wird.

Die Auswertung der obigen Integrale erfolgte mit der CUBA-Bibliothek [67]. Für $p_{F(A)}^{(2)}$ wurde dabei die Routine *divonne* benutzt. Das Integral zum Teil B faktorisiert in zwei unabhängige Impulsintegrationen für die Fermion- und die Gluonschleife. Das vierdimensionale ($T = 0$)-Integral über den Gluonimpuls ergibt dabei gerade die Konstante Z_0 , die im Anhang von [42] auf 396 signifikante Stellen angegeben wird. Die restlichen drei Integrationen wurden mit der CUBA-Routine *cuhre* ausgewertet. Zur Kontrolle diente für alle Integrationen die *vegas*-Routine.

6.3.2. Kontinuumslices für die erste fermionische Druckkorrektur

In den Abbildungen 6.11 und 6.12 sind die Resultate zu den Gleichungen (6.43) und (6.44) für verschiedene Parameter wiedergegeben. Dabei wurden zur Durchführung des Kontinuumslices bei größer werdendem N_t jeweils die physikalischen Bedingungen über $m/T = amN_t$ festgehalten. Die Werte sind in der nachstehenden Tabelle zusammengetragen.

N_t	$p_F^{(2)}/p_{F,\text{Kontinuum}}^{(2)}$					
	$m/T = 0$	$m/T = 0.005$			$m/T = 0.1$	
	Wilson	Wilson	voller <i>twist</i>	Wilson	voller <i>twist</i>	<i>staggered</i>
4	27.5(3)	27.07(6)	27.4(3)	28.90(8)	28.4(1)	4.1(2)
5	20.8(7)	20.4(2)	21.0(6)	23.3(2)	22.8(3)	
6	15(2)	14.0(3)	15(2)	18.4(4)	18.1(6)	4.0(5)
7	11(3)	9.3(6)	10(3)	15.8(8)	16(1)	
8	10(4)	7(1)	8(4)	16(2)	16(2)	3(3)

Die Werte für die *staggered* Fermionen sind wie im wechselwirkungsfreien Fall als Spezialfall der Wilson'schen Fermionen mit Wilsonparameter $r = 0$, d. h. also als naive Fermionen, berechnet worden. Sie reproduzieren Ergebnisse aus [43].

In Abbildung 6.11 ist deutlich zu erkennen, dass die Wilson-Fermionen verglichen mit denen vom *staggered* Typ wesentlich größere Diskretisierungsfehler aufweisen. Dies war auch schon im wechselwirkungsfreien Fall – vgl. Abbildung 6.6 – zu beobachten. Allerdings ist der Effekt für die $\mathcal{O}(g^2)$ -Korrektur noch sehr viel ausgeprägter.

In Abbildung 6.12 ist die $\mathcal{O}(g^2)$ -Korrektur für Fermionen verschiedener Massen jeweils für maximalen Verdrehungswinkel und unmodifizierte Wilson-Fermionen gezeigt. Bei dem kleineren der beiden Parameterwerte $m/T = 0.005$ ist kein Unterschied zum masselosen Fall zu erkennen; alle Punkte stimmen innerhalb ihrer jeweiligen Unsicherheit überein. Die Ergebnisse für $m/T = 0.1$ liegen stets oberhalb der anderen Punkte, d. h. hier sind die Diskretisierungseffekte größer. Dies ist für höhere Massen, die näher am Cutoff a^{-1} liegen, so zu erwarten. Der Unterschied zwischen maximaler chiraler Verdrehung und normalen Wilson'schen Fermionen ist gering. Bei kleineren N_t weisen die Fermionen mit maximal verdrehter Masse etwas geringere Gittereffekte auf als die unmodifizierten. Im Kontinuumslices $N_t \rightarrow \infty$ muss das Ergebnis unabhängig vom Verdrehungswinkel sein, was mit den erhaltenen Ergebnissen kompatibel ist.

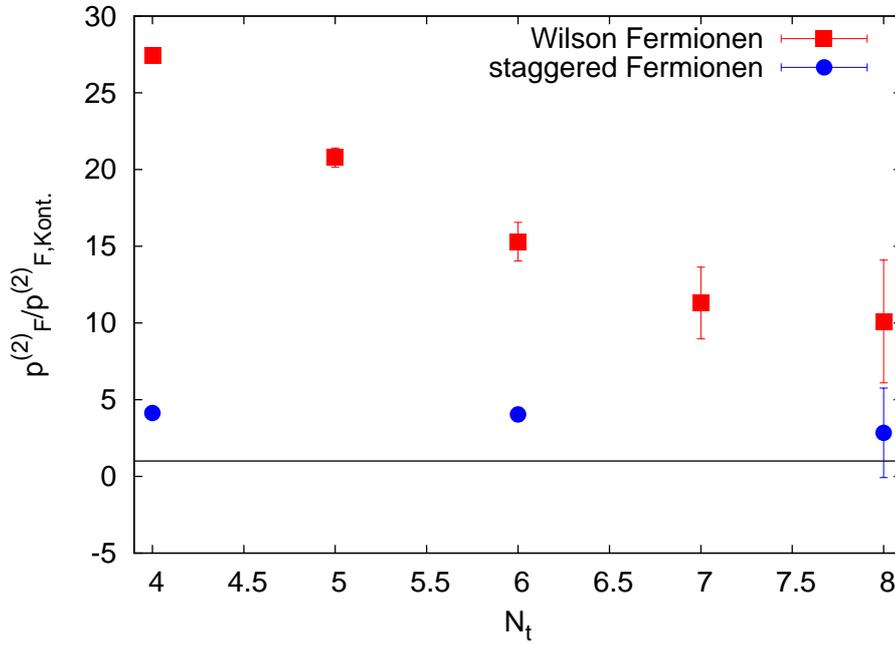


Abbildung 6.11: Korrektur zum Druck in Ordnung g^2 normiert auf den Kontinuums Grenzwert für masselose Fermionen.

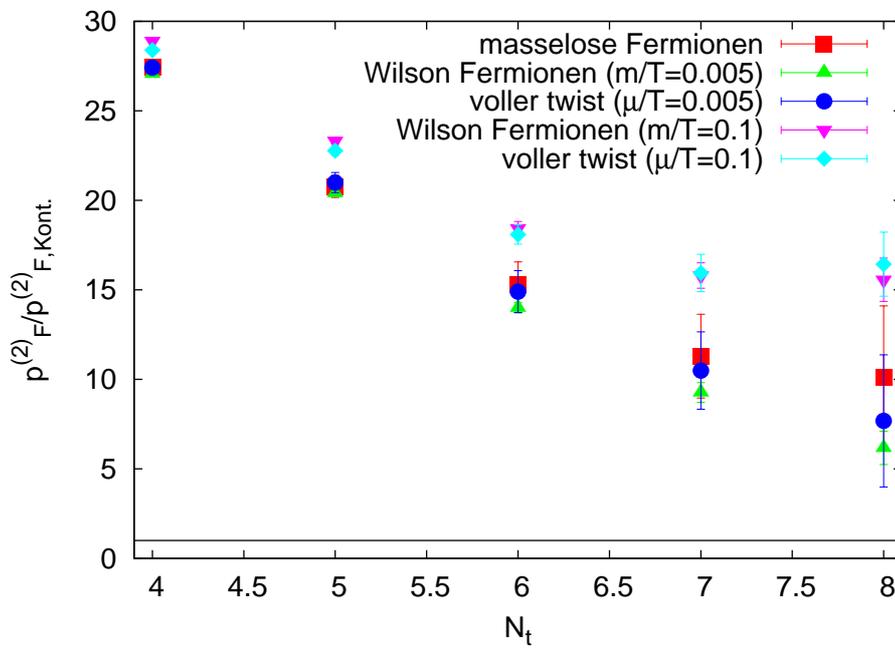


Abbildung 6.12: Korrektur zum Druck in Ordnung g^2 normiert auf den Kontinuums Grenzwert für Fermionen bei verschiedenen Massen.

7. Phasenstruktur der tmQCD bei endlicher Temperatur

In den Abschnitten 3.2 und 4.3 wurde die nichttriviale Phasenstruktur der Gitter-QCD mit Wilson'schen bzw. tmQCD-Fermionen bei verschwindender Temperatur vorgestellt. Bei starker Kopplung gibt es eine Aoki-Phase in der $(\mu = 0)$ -Ebene, an die sich für schwächere Kopplung eine Phasenübergangsfläche anschließt. Der Schnitt dieser Fläche mit der $(\mu = 0)$ -Ebene ist die Kurve des kritischen Hopping-Parameters $\kappa_c(\beta, T = 0)$.¹ Für nichtverschwindende Temperaturen muss dieses Bild modifiziert werden.

Nach einigen generellen Bemerkungen zur Untersuchung des thermischen Phasenübergangs der QCD mittels numerischer Simulationen im folgenden Abschnitt wird die spekulative Phasenstruktur im (κ, β, μ) -Raum diskutiert. Der Rest dieses Kapitels beschäftigt sich mit den Simulationen, welche unter Verwendung des GHMC [58] durchgeführt worden sind. Die Größe der dabei erreichten Statistiken ist in Anhang A.2 angegeben. Die Simulationsergebnisse erlauben Aussagen über die mögliche Struktur des Phasendiagramms.

Alle Simulationen wurden auf einem $16^3 \times 8$ -Gitter auf den apeNEXT in Rom gemacht (vgl. [68]). Die verwendeten Observablen sind die Plakette, der Realteil des Polyakov-Loops und die Pionnorm, die in Abschnitt 5.3 eingeführt worden sind. Zu Polyakov-Loop und Plakette wurde jeweils auch die Suszeptibilität bestimmt, die beim Übergang ein Maximum aufweisen muss. Die Pionnorm zeigt als Korrelator schon selbst dieses Verhalten. Die Suszeptibilität ist wie folgt normiert:

$$\chi_O = N_s^3 \left(\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2 \right) \quad (7.1)$$

7.1. Thermischer Phasenübergang der QCD auf dem Gitter

In dieser Arbeit werden die Eigenschaften der tmQCD bei endlichen Temperaturen untersucht. Dieser Abschnitt dient dazu, den Anschluss an die physikalische Fragestellungen herzustellen, die sich gegebenenfalls zukünftig unter Verwendung der tmQCD bearbeiten lassen. Dabei geht es zum einen um die Klassifikation von Phasenübergängen durch Gittersimulationen und zum anderen um die Massenabhängigkeit des thermischen QCD-Übergangs.

7.1.1. Klassifikation von Phasenübergängen

Fisher [69] folgend werden Phasenübergänge im thermodynamischen Limes durch Nicht-analytizitäten in den Ableitungen des jeweils betrachteten thermodynamischen Potentials, d. h. hier der freien Energie $F = -T \ln Z$, klassifiziert, wobei man Phasenübergänge

¹In diesem Abschnitt bezeichnet β stets die inverse Kopplung.

erster Ordnung von solchen höherer Ordnung unterscheidet. Im Falle eines endlichen Sprungs in einer der ersten Ableitungen des thermodynamischen Potentials liegt ein Übergang erster Ordnung vor. Bei einem Übergang höherer Ordnung sind entsprechend alle ersten Ableitungen analytisch. Üblicherweise unterscheidet man ferner zwischen Übergängen zweiter Ordnung, bei denen wenigstens eine der zweiten Ableitungen divergiert, und kontinuierlichen bzw. analytischen Übergängen – vgl. [70, Kap. 2.1].

Im Falle des Ferromagneten als häufig gewähltem Beispielsystem [30, 69, 70] sind die Magnetisierung, die sich aus der Ableitung nach dem äußeren Feld H bei festgehaltener Temperatur ergibt, sowie die zugehörige isotherme Suszeptibilität wichtige Observablen:

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T \quad \chi_T = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right)_T \quad (7.2)$$

Unterhalb einer kritischen Temperatur T_c und bei verschwindendem äußeren Feld H nimmt die Magnetisierung, die die mittlere Ausrichtung der Spins angibt, einen nichtverschwindenden Wert an, sodass das System eine Vorzugsrichtung aufweist. Dadurch wird die Symmetrie bezüglich der Ausrichtung der Spins spontan gebrochen. Bei höheren Temperaturen wird diese Symmetrie wieder hergestellt und die Magnetisierung verschwindet. Damit dient die Magnetisierung als Ordnungsparameter, der angibt, in welcher Phase sich das System befindet.

Bei einem Übergang erster Ordnung ändert sich die erste Ableitung des thermodynamischen Potentials diskontinuierlich. Dabei können metastabile Zustände auftreten, in denen das System bei einem Phasenübergang im nicht mehr thermodynamisch stabilen Zustand verbleibt, bevor es weiter vom Übergangspunkt entfernt in den neuen Grundzustand springt. Die zweite Ableitung des Potentials, d. h. die Suszeptibilität hat wegen des Sprungs in der ersten Ableitung die Form einer δ -Funktion. Bei dem Beispielsystem des Ferromagneten tritt ein solcher Phasenübergang erster Ordnung auf, wenn in der Tieftemperaturphase die Richtung des äußeren Feldes wechselt. Die genannten Metastabilitäten sind dann der als Hysterese bekannte Effekt.

Da bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung erst die zweite Ableitung des thermodynamischen Potentials divergiert, ändert sich die erste Ableitung kontinuierlich. Wegen der Divergenz der zweiten Ableitung im Übergangspunkt muss aber die Änderung der ersten Ableitung mit senkrechter Steigung an dieser Stelle sehr abrupt geschehen. Dies ist das Verhalten, das ein Ferromagnet zeigt, wenn die Temperatur bei verschwindendem äußeren Feld erhöht wird. Bei Phasenübergängen höherer Ordnung sind die beiden ersten Ableitungen analytisch und der Übergang erfolgt kontinuierlich mit endlicher Breite. Ein Ferromagnet in einem nichtverschwindenden äußeren Feld verhält sich in dieser Weise bei Temperaturänderung; insbesondere lässt sich ein Übergangspunkt nicht mehr eindeutig festlegen.

In Gittersimulationen mit dem Ziel, einen Phasenübergang aufzufinden und zu klassifizieren, stellt sich das Problem, dass stets bei endlichem Volumen, d. h. nicht im thermodynamischen Limes, simuliert werden muss. Die Zustandssumme ist in diesem Fall analytisch und besitzt keine reellen Nullstellen als Funktion der thermodynamischen Parameter T, V [71]. Damit sind die freie Energie und alle Ableitungen analytisch. Die Nichtanalytizitäten entwickeln sich erst für $V \rightarrow \infty$, wenn sich die Nullstellen auf die reelle Achse zubewegen. Findet man also einen Übergang in einer Gittersimulation, so ist dieser immer kontinuierlich und das Verhalten im thermodynamischen Limes ist zunächst unklar.

Ein Merkmal eines Übergangs erster Ordnung im endlichen Volumen besteht darin, dass sich das metastabile Verhalten als doppeltes Maximum in den Häufigkeitsverteilungen entsprechender Observablen zeigt. Ein systematischer Weg, die Art eines Phasenübergangs festzustellen, steht durch das sogenannte *finite size scaling* zur Verfügung, wo die Volumenabhängigkeit des beobachteten Übergangs untersucht wird; vgl. [70, Kap. 2.5, 2.6]. Hierfür bieten sich zum einen Suszeptibilität und spezifische Wärme an, die als zweite Ableitungen des thermodynamischen Potentials im thermodynamischen Limes für Übergänge erster und zweiter Ordnung divergieren müssen, während sie für analytische Übergänge einen endlichen Wert erreichen. Zum anderen kann man betrachten, wie sich die Position des (pseudo-)kritischen Punktes, festgelegt z. B. über das Maximum der Suszeptibilität, verändert.

Für einen Phasenübergang erster Ordnung in d Raumdimensionen und einem hinreichend großen Volumen $V = L^d$ gilt:

$$c_{\max} \sim L^d \quad \chi_{\max} \sim L^d \quad \beta_c(\infty) - \beta_c(L) \sim L^{-d} \quad (7.3)$$

Phasenübergänge zweiter Ordnung lassen sich in Universalitätsklassen einordnen, die durch wenige globale Eigenschaften, wie Symmetrien und die Dimension des Systems, festgelegt werden [30, Kap. 7]. Der Grund hierfür besteht in der Divergenz der Korrelationslänge am kritischen Punkt, weswegen mikroskopische Wechselwirkungen an Bedeutung verlieren und das System kollektives Verhalten zeigt, das sich durch wenige kritische Exponenten charakterisieren lässt. So verschwindet im unendlichen Volumen der Ordnungsparameter am kritischen Punkt wie $|T - T_c|^\beta$, während die Suszeptibilität und die spezifische Wärme divergieren:

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma} \quad c \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad (7.4)$$

Ein weiterer kritischer Exponent gibt die Divergenz der Korrelationslänge ξ an:

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (7.5)$$

Mit den so eingeführten Größen gilt für einen Phasenübergang zweiter Ordnung für die Annäherung an den thermodynamischen Limes $V = L^d \rightarrow \infty$:

$$c_{\max} \sim L^{\alpha/\nu} \quad \chi_{\max} \sim L^{\gamma/\nu} \quad \beta_c(\infty) - \beta_c(L) \sim L^{-1/\nu} \quad (7.6)$$

7.1.2. Massenabhängigkeit des thermischen Übergangs

Die Art des thermischen Phasenübergangs der QCD hängt von der Größe der Massenparameter m_{ud} und m_s ab, wobei m_s die *strange*-Quarkmasse und m_{ud} die Masse der als entartet angenommenen *up*- und *down*-Quarks angibt; am physikalischen Punkt erfolgt der thermische Übergang kontinuierlich. Der hier gegebenen Beschreibung liegen [2, 72] zugrunde.

Im Grenzfall der reinen Eichtheorie und der masselosen QCD erfolgt der thermische Übergang als Phasenübergang erster Ordnung. In der masselosen QCD wird durch den Übergang die chirale Symmetrie wiederhergestellt und das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ verschwindet als Ordnungsparameter in der Hochtemperaturphase. In der reinen Eichtheorie hingegen ist der Polyakov-Loop der Ordnungsparameter bezüglich der Z_3 -Symmetrie,

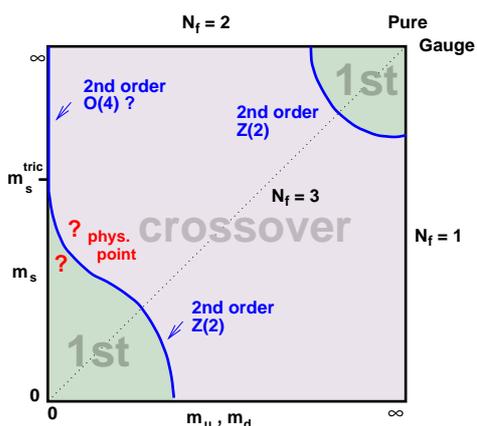


Abbildung 7.1: Art des thermischen Übergangs in Abhängigkeit der (entarteten) up - $down$ Quarkmasse m_{ud} und der $strange$ -Quarkmasse m_s ; aus [5]

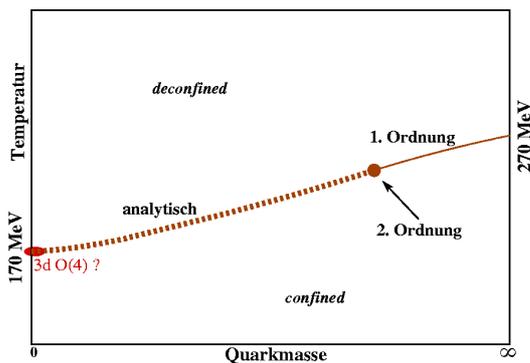


Abbildung 7.2: Qualitativer Verlauf des thermischen QCD-Übergangs für $n_f = 2$ Quarks in Abhängigkeit der Quarkmasse. Die ungefähren Temperaturwerte im chiralen Limes und im Grenzfall der reinen Eichtheorie wurden gemäß [2] ergänzt.

die bei hohen Temperaturen gebrochen ist, was, wie in Abschnitt 5.3.1 besprochen, zum Deconfinement korrespondiert.

Diese Grenzfälle gehören in der (m_{ud}, m_s) -Ebene – vgl. Abbildung 7.1 – zu Bereichen mit Übergangsverhalten erster Ordnung in der linken unteren ($m_{ud} = m_s = 0$) und der rechten oberen Ecke ($m_{ud} = m_s = \infty$), die durch Linien zweiter Ordnung begrenzt werden. Zwischen diesen beiden Bereichen erstreckt sich eine Region, in der ein kontinuierlicher Übergang erfolgt. Noch ungeklärt ist das Verhalten im chiralen Limes der zwei-*flavour*-Theorie ($m_s = \infty, m_{ud} \rightarrow 0$); im Falle eines Übergangs zweiter Ordnung müsste dieser zur Universalitätsklasse der $3d O(4)$ -Spinmodelle gehören [2].

In Abbildung 7.2 wird der qualitative Verlauf des thermischen Übergangs in Abhängigkeit der Masse für $n_f = 2$ Quarks gezeigt [2]. Die Übergangstemperatur steigt mit der Masse. Im chiralen Limes liegt sie bei etwa 170 MeV und für unendlich schwere Quarks, d. h. im Grenzfall der reinen Eichtheorie, bei 270 MeV. Die Art des Übergangs im chiralen Limes ist nicht klar. Für mittlere Quarkmassen liegt ein analytischer Übergang vor, der bei einer kritischen Masse, bei der ein Übergang zweiter Ordnung erfolgt, in einen Übergang erster Ordnung übergeht.

7.2. Mögliche Phasenstruktur

Die Eigenschaften der Gitter-QCD mit reinen Wilson-Fermionen bei nichtverschwindenden Temperaturen sind schon seit längerer Zeit untersucht worden, vgl. z. B. [9, 73, 74, 75]. Dabei zeichnet sich folgendes Bild ab:

Das wesentliche neue Element gegenüber dem Fall verschwindender Temperaturen ist die thermische Übergangslinie $\kappa_T(\beta)$, unterhalb welcher sich die Tieftemperaturphase befindet, in der Farbladungsträger dem Confinement unterliegen. Während $\kappa_T(\beta)$ bei einem endlichen maximalen Wert der inversen Kopplung β endet, nähert sich die Kurve für kleiner werdendes β dem kritischen $\kappa_c(\beta, T = 0)$ an. Eine Aoki-Phase existiert

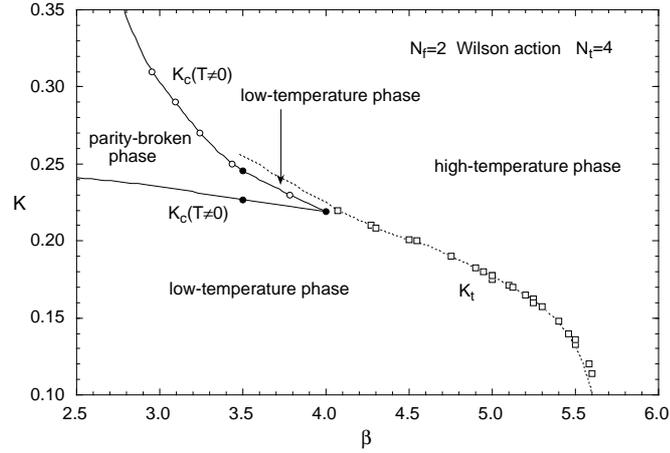


Abbildung 7.3: Aoki-Phase für Wilson-Fermionen bei endlichen Temperaturen; aus [74]

im Starkkopplungsregime für $\kappa < \kappa_T(\beta)$. Ob die obere Grenze der Aoki-Phase mit dem thermischen Übergang zusammenfällt, ist nicht endgültig geklärt [74, 75], was in Abbildung 7.3 gezeigt wird. Sollte es tatsächlich zwei getrennte Übergangslinien geben, hängt deren Abstand sicherlich von der Eichwirkung ab. Indizien für eine solche Lücke wurden mit der tISym-Wirkung in [17] gefunden. Ferner besteht die Möglichkeit, auf endlichen Gittern Relikte der Übergänge bei $T = 0$ zu finden (vgl. [73]).

Creutz hat ein Modell für eine mögliche Erweiterung der Phasenstruktur in den (κ, β, μ) -Raum vorgeschlagen [76]. Er argumentiert dabei mit der Kontinuumsymmetrie der QCD unter Rotationen in der (m, μ) -Ebene. Auch wenn diese Symmetrie auf dem Gitter nicht existiert, sollte sie in Richtung des Kontinuums zum mindesten näherungsweise gültig sein. Dabei übersetzt sich die Rotation von (m, μ) in die folgende Beziehung für die unrenormierten Gittergrößen:

$$M = \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c(\beta)} \right)^2 + \mu^2} \quad (7.7)$$

Man kann erwarten, dass die obige Beziehung durch die Dynamik verzerrt oder sogar aufgehoben wird. Dies wird schon allein daraus ersichtlich, dass die $\mathcal{O}(a)$ -Effekte eine Funktion des Verdrehungswinkels sind. Creutz' Argumentation folgend müsste man dennoch auf dem Gitter bei hinreichend schwacher Kopplung Linien gleicher Physik für jede β -Ebene finden. Dadurch würde die thermische Übergangslinie $\kappa_T(\beta)$ Teil einer konischen Übergangsfläche $\kappa_T(\beta, \mu)$.

Im Starkkopplungsregime kann man nicht erwarten, dass die Beziehung (7.7) auch nur näherungsweise realisiert ist. Dementsprechend sollten keine Linien konstanter Physik existieren. Vielmehr kann in der $(\mu = 0)$ -Ebene die Aoki-Phase liegen, wie dies in den Untersuchungen für gewöhnliche Wilson-Fermionen [74, 75] tatsächlich gefunden worden ist. Abbildung 7.4 zeigt diese spekulative Phasenstruktur, während Abbildung 7.5 einen Schnitt für festes, großes β mit einer möglichen Linie konstanter Physik zeigt.

Zwar muss die bis hierher beschriebene Struktur beim Übergang zum Kontinuum realisiert sein. Aber es ist durchaus denkbar, dass dies erst sehr spät geschieht, sodass über weite Bereiche des Gitterabstandes eine qualitativ andere Phasenstruktur auftritt.

Davon sollte in erster Linie der Bereich $\kappa > \kappa_c$ betroffen sein, sodass man unter der Annahme, dass die μ -Achse weiterhin eine Symmetrieachse des Phasendiagramms ist, für festes β im Schwachkopplungsregime ein Verhalten ähnlich zu dem in Abbildung 7.6 gezeigten vermuten könnte. Diese würde mit kleiner werdendem a mehr und mehr in die von Creutz beschriebene Form – vgl. Abbildung 7.5 – übergehen.

7.2.1. Modell eines effektiven Potentials

Neben der Diskussion der Phasenstruktur der tmQCD bei endlichen Temperaturen auf Grundlage von Gleichung (7.7) wird in [76] ein effektives Potential aufgestellt, das qualitative Merkmale des thermischen Übergangs in der tmQCD wiedergeben soll. Das Potential besteht aus drei Teilen, von denen der erste den Deconfinement-Übergang in der reinen Eichtheorie modelliert; die relevante Observable ist der Polyakov-Loop L :

$$V_G(L) = \alpha_1 |L|^4 + \alpha_2 (T_c - T) |L|^2 - \alpha_3 \text{Re}(L^3) - \alpha_4 \text{Re}(L) \quad (7.8)$$

Die ersten beiden Terme führen dabei zu einem Phasenübergang, bei dem in der Hochtemperaturphase der Polyakov-Loop einen nichtverschwindenden Erwartungswert annimmt. Der α_3 -Term reduziert die Symmetrie von $U(1)$ auf Z_3 und führt zu einem Übergang erster Ordnung, während der letzte Term, der linear in $\text{Re}(L)$ ist, aus dem echten Phasenübergang einen kontinuierlichen Übergang macht und so die Anwesenheit dynamischer Quarks berücksichtigt.

Der zweite Teil des Potentials befasst sich mit dem Quarksektor und ist verwandt mit den Modellen der chiralen Störungstheorie bei $T = 0$ [56]:

$$V_Q(\sigma, \vec{\pi}) = \lambda(\sigma^2 + \vec{\pi}^2 - v^2)^2 - c_1 \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c} \right) \sigma + c_2 \sigma^2 - \mu \pi_3 \quad (7.9)$$

Die Freiheitsgrade werden durch die Variablen $\sigma \sim \bar{\psi}\psi$ und $\pi^j \sim i\bar{\psi}\gamma_5\tau^j\psi$ ($j = 1, 2, 3$) beschrieben. Neben den beiden in den Variablen linearen Massentermen tritt insbesondere mit $c_2\sigma^2$ ein Term auf, der Gitterartefakte berücksichtigen soll. Da hier der Bereich großer β betrachtet wird, in dem bei $T = 0$ das in Abschnitt 4.3 als normales Szenario bezeichnete Verhalten realisiert ist, muss c_2 negativ gewählt werden. Darüberhinaus hängt κ_c von der inversen Kopplung β ab, was nur dann unberücksichtigt bleiben kann, wenn diese Größe fixiert wird.

Die beiden bisher eingeführten Teile des Potentials werden durch den dritten Teil gekoppelt:

$$V(\sigma, \pi, L) = V_G(L) + V_Q(\sigma, \pi) + \alpha_5 |L|^2 (\sigma^2 + \pi^2) \quad (7.10)$$

Durch diese Kopplung kann ein großer Wert des Polyakov-Loops dazu führen, dass das Potential sein Minimum für verschwindendes chirales Kondensat annimmt.

Das so beschriebene effektive Potential muss aufgrund der Beziehung $V(\pi_3; \mu) = V(-\pi_3; -\mu)$ eine zur κ -Achse symmetrische Phasenstruktur beschreiben. Eine weitere Symmetrie gilt für die durch κ parametrisierte unverdrehte Masse:

$$V\left(\sigma, \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c}\right)\right) = V\left(-\sigma, -\left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c}\right)\right) \quad (7.11)$$

Durch die obige Beziehung wird jedem Wert von κ ein weiterer zugeordnet, bei dem das Phasendiagramm dieselbe Struktur aufweist. Es lassen sich also die beiden folgenden

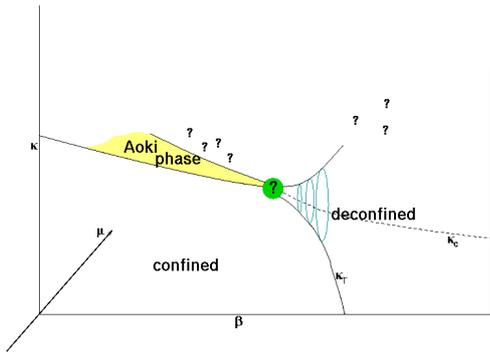


Abbildung 7.4: Spekulative Phasenstruktur basierend auf dem Modell in [76]. Die Aoki-Phase liegt in der ($\mu = 0$)-Ebene, während sich die thermische Übergangsfläche in den Bereich $\mu \neq 0$ erstreckt.

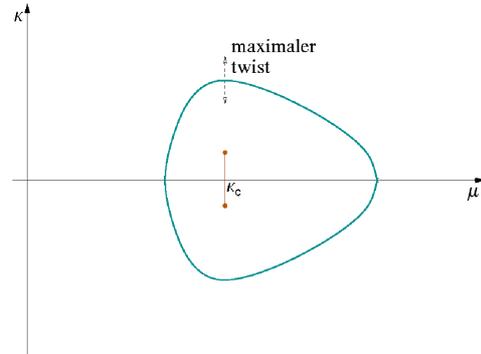


Abbildung 7.5: Schnitt für festes hinreichend großes β durch das nebenstehende Phasendiagramm. Die geschlossene Kurve skizziert die Linie gleicher Physik für den thermischen Phasenübergang; die erste Ordnung Übergangslinie aus der $T = 0$ chiralen Störungstheorie ist ebenfalls eingezeichnet.

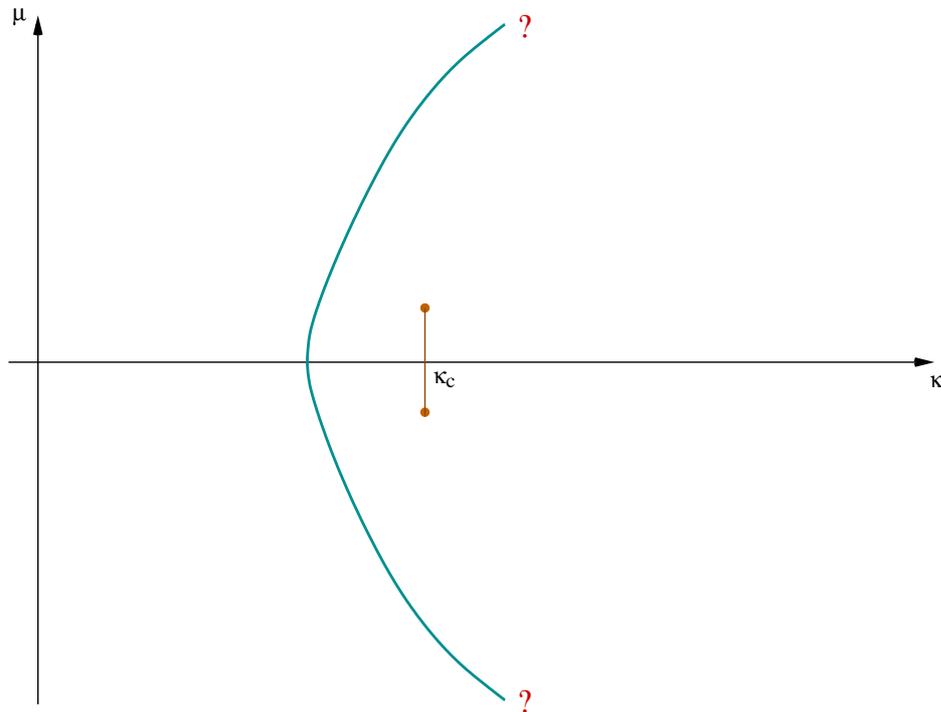


Abbildung 7.6: Schnitt für festes hinreichend großes β durch das (κ, β, μ) -Phasendiagramm, wobei ein möglicher zu Abbildung 7.5 alternativer Verlauf der thermischen Übergangslinie gezeigt wird: Die thermische Übergangslinie $\kappa_T(\mu)$ erreicht bei κ_c keinen Scheitelpunkt und über den weiteren Verlauf im Bereich $\kappa > \kappa_c$ wird keine Aussage getroffen.

Symmetrien unabhängig von den gewählten Parametern angeben:

$$\mu \rightarrow -\mu \quad (7.12a)$$

$$\kappa \rightarrow \left(\frac{2}{\kappa_c} - \frac{1}{\kappa} \right)^{-1} \quad (7.12b)$$

Somit sind zwei Achsen im (κ, μ) -Diagramm ausgezeichnet. Das ist zum einen die oben beschriebene κ -Achse als Symmetrieachse. Die zweite wird durch den Wert $\kappa = \kappa_c$, der der Fixpunkt der durch Gleichung (7.12b) gegebenen Abbildung ist, definiert.

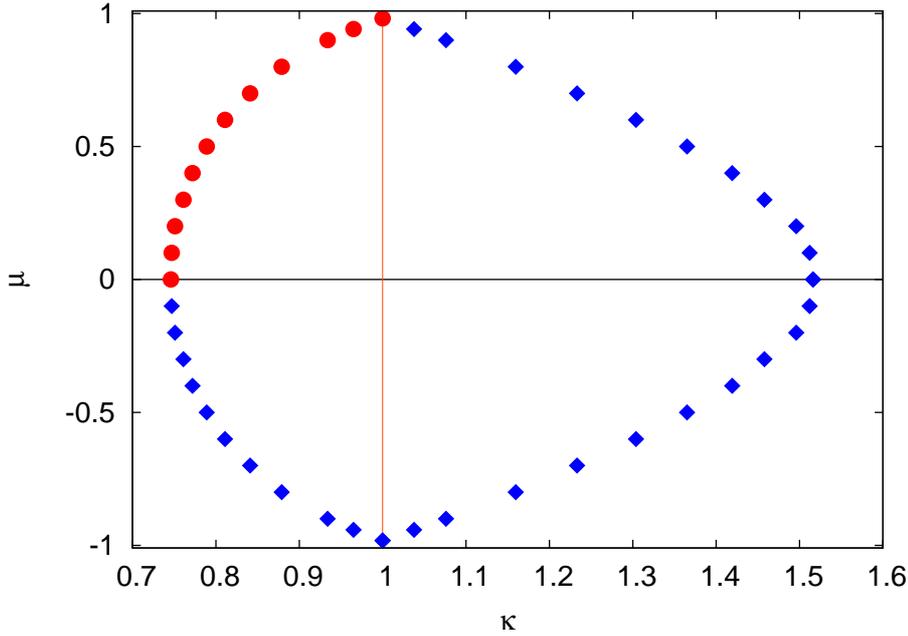


Abbildung 7.7: Thermische Übergangslinie in der (κ, μ) -Ebene für das in Gleichung (7.10) angegebene effektive Potential bei $T = 1.6$ mit den Parameterwerten aus (7.13) und (7.14). Die blauen Punkte wurden mittels der Relationen in (7.12) aus den roten berechnet.

Für diese Arbeit wurde die thermische Übergangslinie $\kappa_T(\mu)$ aus dem effektiven Potential für eine feste Temperatur beispielhaft für einen Parametersatz bestimmt. Dabei wurde auf die Relationen (7.12) zurückgegriffen. Die Parameter der reinen Eichtheorie, in der hier der Polyakov-Loop vereinfachend als reelle Variable behandelt wird, wurden so festgelegt, dass der Deconfinement-Übergang gut erkennbar ist.

$$\alpha_1 = 2 \quad \alpha_2 = 3 \quad \alpha_3 = 2 \quad \alpha_4 = 0.1 \quad T_c = 1 \quad (7.13)$$

Die restlichen Parameter wurden wie folgt fixiert:

$$\kappa_c = 1 \quad \lambda = 1 \quad v = 1 \quad \pi_1 = \pi_2 = 0 \quad c_1 = 0.9 \quad c_2 = -0.6 \quad \alpha_5 = 5 \quad (7.14)$$

In diesem Fall befindet sich das masselose System ($\kappa = 1, \mu = 0$) bei einer Temperatur $T = 1.6$ in der Deconfinement-Phase. Erhöht man die Masse durch Veränderung von κ oder μ , so kann man einen thermischen Übergangspunkt (κ_T, μ_T) zur Confinement-Phase finden. In Abbildung 7.7 ist die resultierende thermische Übergangslinie dargestellt, die mit dem Creutz'schen Modell – vgl. Abbildung 7.5 – konsistent ist.

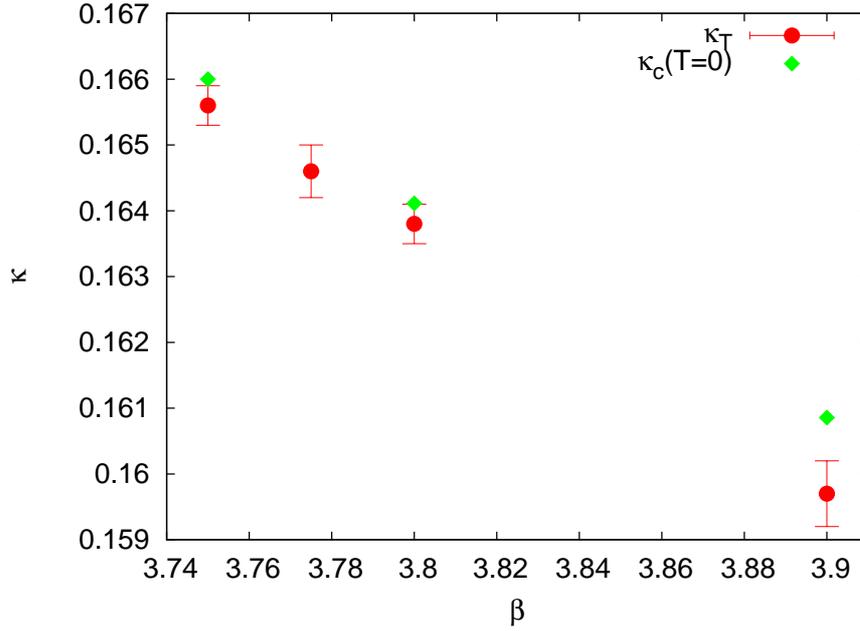


Abbildung 7.8: Ergebnisse für die thermische Übergangslinie bei $\mu = 0.005$ verglichen mit den verfügbaren $\kappa_c(\beta, T = 0)$.

7.3. Simulationsergebnisse

7.3.1. Thermische Übergangslinie bei $\mu = 0.005$

In den Simulationen der tmQCD wurde bei $\mu = 0.005$ der Punkt (κ, β) des thermischen Übergangs für drei Werte von β bestimmt: $\beta \in \{3.75, 3.775, 3.8\}$. Die Ergebnisse sind auch in [17] zu finden. In den Abbildungen 7.9 bis 7.13 sind die Observablen gezeigt. Die erhaltenen Punkte für die thermische Übergangslinie $\kappa_T(\beta, \mu)$ sind in der nachfolgenden Tabelle sowie in Abbildung 7.8 zusammengefasst. Dabei wurde der Wert für $\beta = 3.9$ aus [16] ergänzt. Außerdem werden die Daten mit den Werten für $\kappa_c(\beta, T = 0)$ aus [15, 57, 77] verglichen.

β	$\kappa_T(\beta, \mu = 0.005)$	$\kappa_c(T = 0, \beta)$
3.75	0.1656(3)	0.1660(1)
3.775	0.1646(4)	–
3.8	0.1638(3)	0.164111
3.9	0.1597(5)	0.160856

Der Abstand zwischen κ_T und κ_c wird mit steigendem β größer. Außerdem fällt κ_T mit steigendem β , d. h. man kann davon ausgehen, dass die Quarkmasse ansteigt. Wegen des Zusammenhangs zwischen der Kopplung und dem Gitterabstand entspricht ferner ein wachsendes β bei festem N_t einer steigenden Temperatur. Somit ist die kritische Temperatur T_c eine mit der Quarkmasse steigende Größe, was zu den existierenden Beobachtungen mit anderen Fermiondiskretisierungen passt (vgl. Abbildung 7.2).

Mit wachsender Quarkmasse, d. h. in diesem Fall mit steigendem β , nimmt insbesondere die Bedeutung des Polyakov-Loops als Observable zu, da das System mit schwereren

Quarks dem Grenzfall der reinen Eichtheorie näher kommt, in der der Polyakov-Loop eigentlich als Ordnungsparameter für den Phasenübergang dient. Gleichzeitig wächst aber auch die Übergangstemperatur, sodass die Plakette immer weniger als Observable geeignet ist. Beide Trends können in den Abbildungen 7.10 bis 7.13 nachvollzogen werden. Dennoch ist aus allen Größen das Übergangsverhalten ablesbar.

Dieses Ergebnis macht deutlich, dass auch bei nichtverschwindendem chiral verdrehten Massenterm eine thermische Übergangslinie gefunden werden kann.

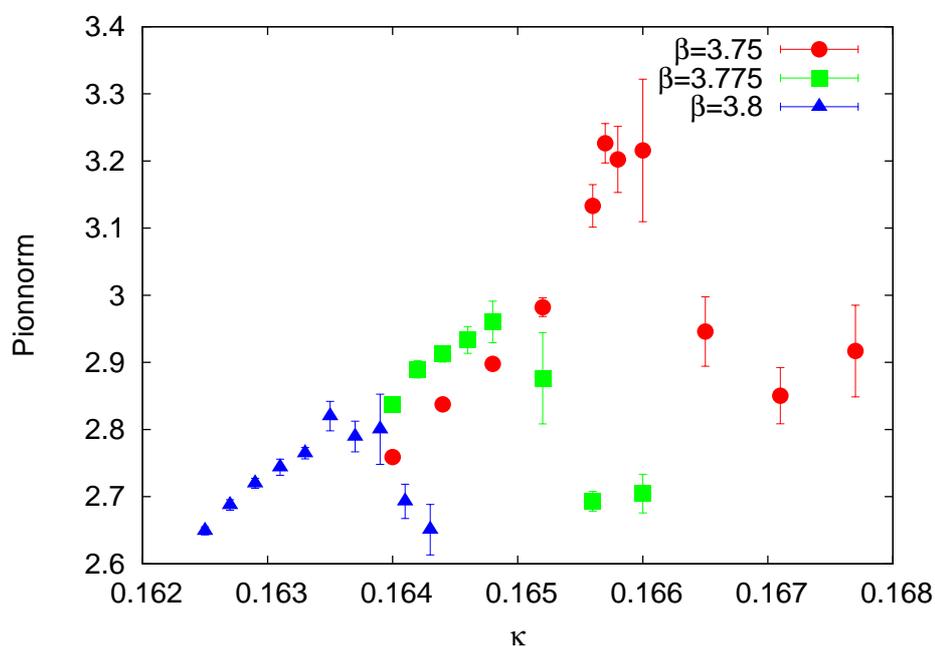


Abbildung 7.9: Pionnorm in Abhängigkeit von κ bei $\mu = 0.005$ und die verschiedenen Werte von β .

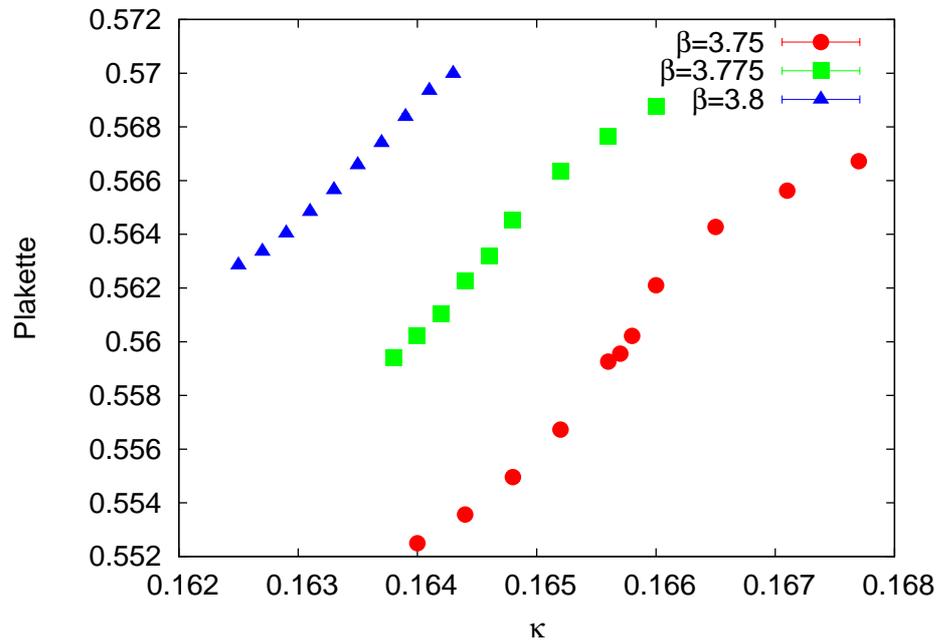


Abbildung 7.10: Erwartungswert der Plakette in Abhängigkeit von κ bei $\mu = 0.005$ und die verschiedenen Werte von β .

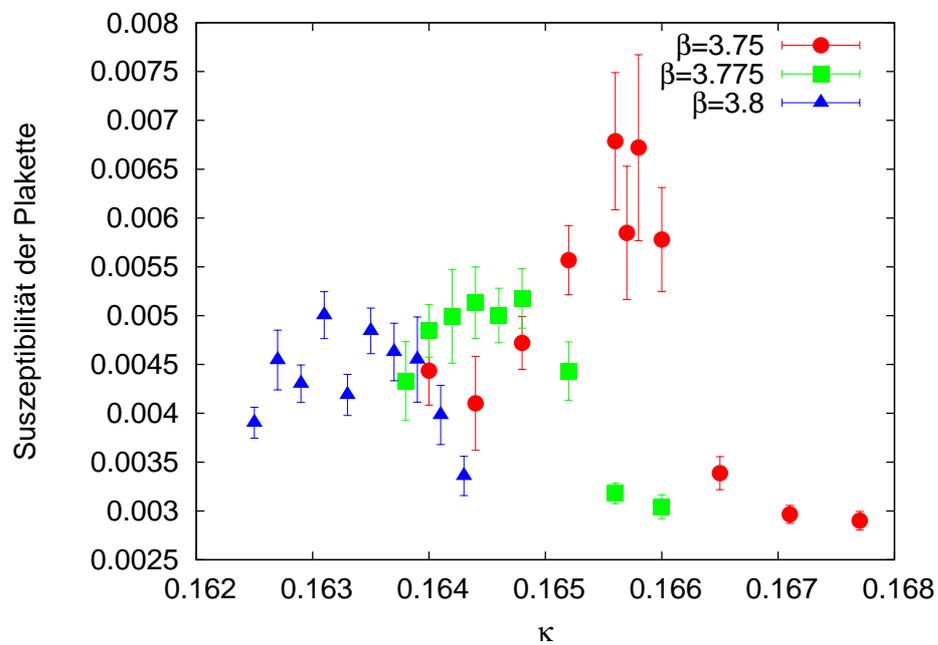


Abbildung 7.11: Suszeptibilität der Plakette in Abhängigkeit von κ bei $\mu = 0.005$ und die verschiedenen Werte von β .

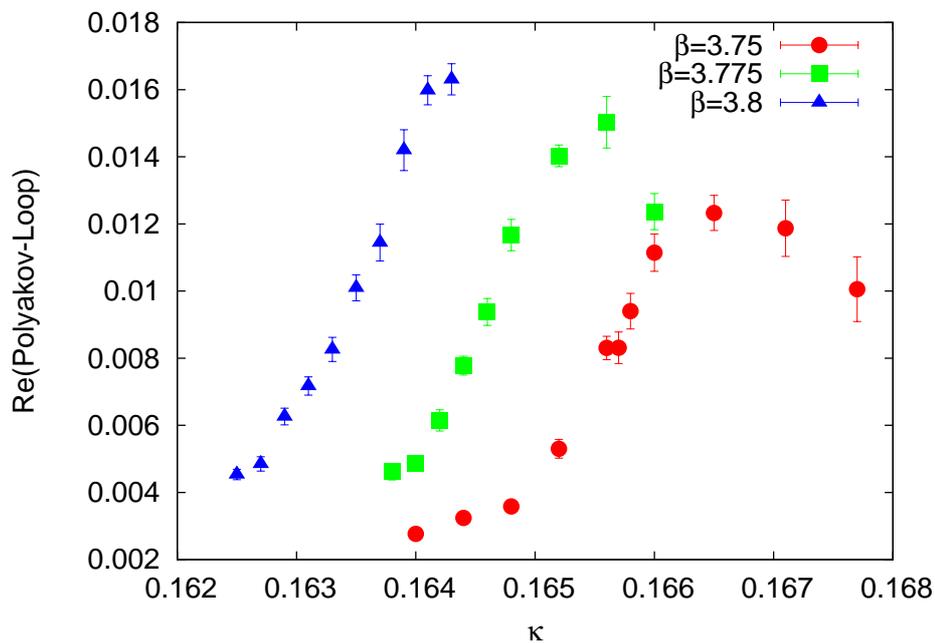


Abbildung 7.12: Reale Teil des Polyakov-Loops in Abhängigkeit von κ bei $\mu = 0.005$ und die verschiedenen Werte von β .

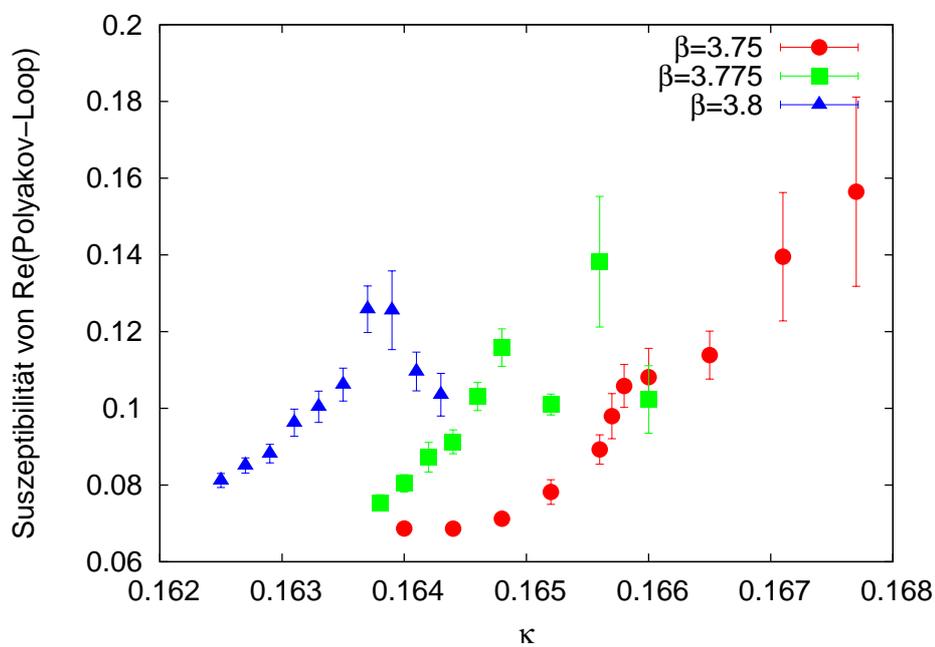


Abbildung 7.13: Suszeptibilität des Realteils des Polyakov-Loops in Abhängigkeit von κ bei $\mu = 0.005$ und die verschiedenen Werte von β .

7.3.2. Thermischer Übergang in der (κ, μ) -Ebene

Dem Creutz'schen Modell für die thermische Phasenübergangsfläche folgend sollte die thermische Übergangslinie $\kappa_T(\mu)$ bei festem β ihren Scheitelpunkt gerade bei voller chiraler Verdrehung erreichen; vgl. Abbildung 7.5. Das Übergangssignal in μ -Richtung, in die die Phasengrenze senkrecht durchstoßen würde, sollte dann deutlich besser sein als das in die dazu orthogonale κ -Richtung. Um dies zu überprüfen wurde in Simulationen bei $\beta = 3.8$ der Übergang zunächst in μ -Richtung gesucht und danach derselbe Übergangspunkt in κ -Richtung betrachtet.

Die Observablen für die μ -Richtung sind in den Abbildungen 7.14 bis 7.18 im relevanten Bereich gezeigt. Aus ihrem Verhalten wird zwar deutlich, dass im betrachteten μ -Intervall ein Übergang stattfindet, der allerdings sehr breit zu sein scheint. So verändert sich zwar die Größe der Plaketten- und Polyakov-Loop-Erwartungswerte deutlich (Abbildungen 7.14 und 7.16), jedoch gibt es keine Region, in der eine rasche Änderung stattfindet. Entsprechend weisen die Suszeptibilitäten (Abbildungen 7.15 und 7.17) keine klaren Maxima auf. Die Fluktuationen bei kleinen μ könnten darauf hindeuten, dass die Simulationen hier durch Überreste der Phasenstruktur bei verschwindender Temperatur beeinträchtigt sind.

Das beste Signal unter den verschiedenen Observablen bietet die Pionnorm, die in Abbildung 7.18 gezeigt ist. Hieraus kann man einen pseudokritischen chiral verdrehten Massenparameter ablesen, der mit den anderen Observablen, insbesondere den Suszeptibilitäten, konsistent ist:

$$\mu_T(\kappa = 0.164111, \beta = 3.8) = 0.018(3) \quad (7.15)$$

Entsprechend wurde der Wert $\mu = 0.018$ für die Untersuchung in κ -Richtung bei demselben β gewählt; in den Abbildungen 7.19 bis 7.23 sind die Observablen gezeigt. Das Signal in diese Richtung ist ähnlich breit wie das in μ -Richtung. Insgesamt kann man folgenden Wert für den thermischen Übergang abschätzen:

$$\kappa_T(\mu = 0.018, \beta = 3.8) = 0.1640(4) \quad (7.16)$$

Bezüglich der Qualität des Signals in κ - und μ -Richtung lässt sich kaum ein Unterschied feststellen. Dies entspricht nicht der Erwartung gemäß der Creutz'schen Modellvorstellung. Das ähnliche Verhalten in beide Richtungen legt vielmehr eine Lage der Übergangslinie wie in Abbildung 7.6 skizziert nahe. Die große Breite und die damit verbundene geringe Qualität des Signals limitieren allerdings die Stärke dieser Aussage.

Es ist möglich, unabhängig von der Signalqualität die Gültigkeit von Gleichung (7.7), die die unrenormierten Massenparameter in Verbindung setzt, anhand der für $\beta = 3.8$ gefundenen Punkte des thermischen Übergangs in der (κ, μ) -Ebene zu überprüfen. Die Ergebnisse für die Abbildung auf eine effektive unrenormierte Quarkmasse gemäß Gleichung (7.7) sind in der folgenden Tabelle zusammengetragen.

$\kappa_T(\beta = 3.8)$	$\mu_T(\beta = 3.8)$	M_{eff}	
0.1638(3)	0.005	0.008(5)	(Abschn. 7.3.1)
0.1640(4)	0.018	0.0181(9)	(Abschn. 7.3.2)
0.164111	0.018(3)	0.018(3)	(Abschn. 7.3.2)

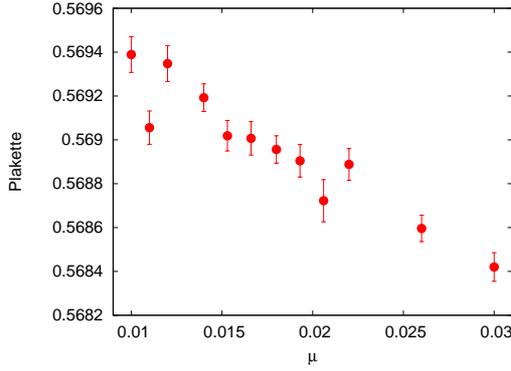


Abbildung 7.14: Erwartungswert der Plakette in Abhängigkeit von μ bei maximaler Verdrehung und $\beta = 3.8$.

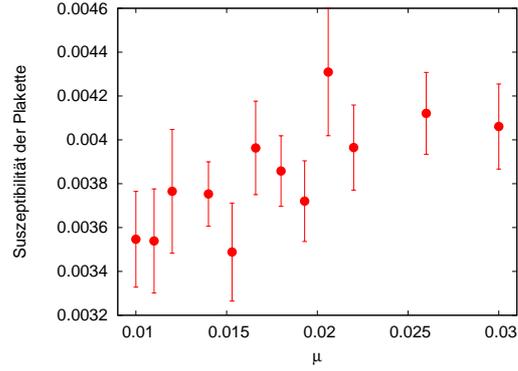


Abbildung 7.15: Suszeptibilität der Plakette in Abhängigkeit von μ bei maximaler Verdrehung und $\beta = 3.8$.

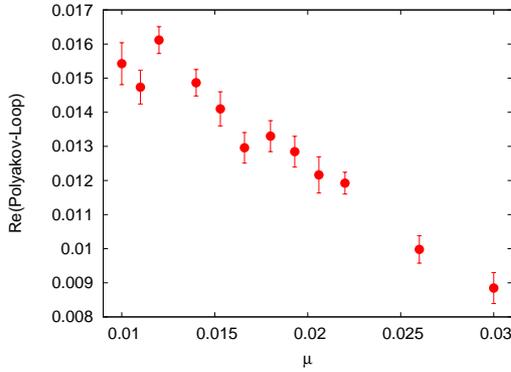


Abbildung 7.16: Realteil des Polyakov-Loops in Abhängigkeit von μ bei maximaler Verdrehung und $\beta = 3.8$.

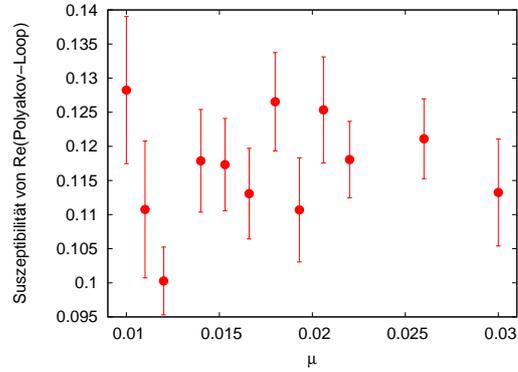


Abbildung 7.17: Suszeptibilität des Realteils des Polyakov-Loops in Abhängigkeit von μ bei maximaler Verdrehung und $\beta = 3.8$.

Die Werte aus Abschnitt 7.3.2 führen zu übereinstimmenden effektiven Massen, da es sich hier im Rahmen der Unsicherheiten um denselben Punkt in der (κ, μ) -Ebene handelt. Das Resultat für M_{eff} aus der Untersuchung bei $\mu = 0.005$ in Abschnitt 7.3.1 hingegen ist signifikant kleiner. Dies deutet ebenfalls auf eine Realisierung der thermischen Übergangslinie wie in Abbildung 7.6 hin.

Um eine weitere Aussage über die Struktur im tmQCD-Phasendiagramm zu erhalten, wurden Daten bei $\beta = 3.9$ und $\kappa = \kappa_c(\beta = 3.9, T = 0)$ in Abhängigkeit von μ gesammelt. Da $\kappa = \kappa_c$ gilt, sollten diese gerade der nackten Quarkmasse entsprechen. Außerdem konnte auf Daten für den Polyakov-Loop bei $\beta = 3.9$ und $\mu = 0.005$, die in [16] verwendet wurden, zurückgegriffen werden. Diese wurden mithilfe von Gleichung (7.7) ebenfalls auf eine effektive unrenormierte Quarkmasse abgebildet. Das Ergebnis, das in Abbildung 7.24 zu sehen ist, macht deutlich, dass bei $\beta = 3.9$ der Zusammenhang zwischen den Daten bei $(\kappa_T, \mu = 0.005)$ und bei $(\kappa_c(\beta), \mu_T)$ näherungsweise durch Gleichung (7.7) beschrieben wird. Zumindest tendentiell kann man aber der Abbildung entnehmen, dass die Daten zu $\mu = 0.005$ einer etwas kleineren effektiven Quarkmasse für den Übergang entsprechen. Dies stimmt qualitativ mit dem obigen Ergebnis für $\beta = 3.8$ überein.

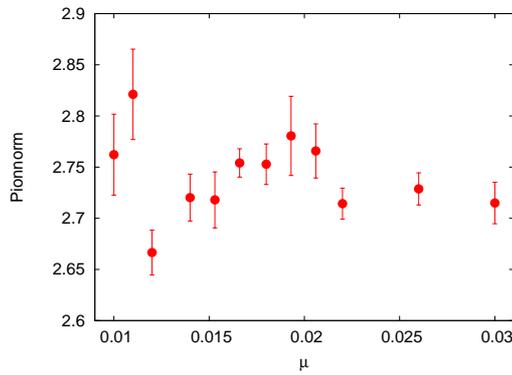


Abbildung 7.18: Pionnorm in Abhängigkeit von μ bei maximaler Verdrehung und $\beta = 3.8$.

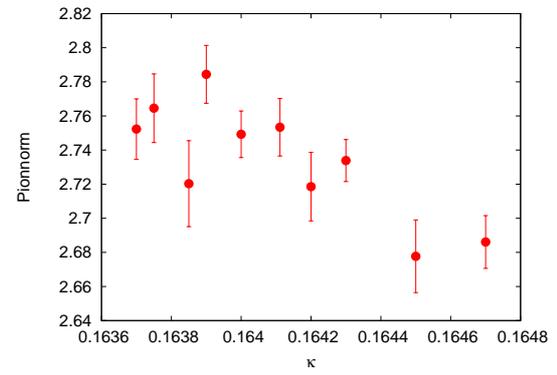


Abbildung 7.19: Pionnorm in Abhängigkeit von κ bei $\beta = 3.8$ und $\mu = 0.018$.

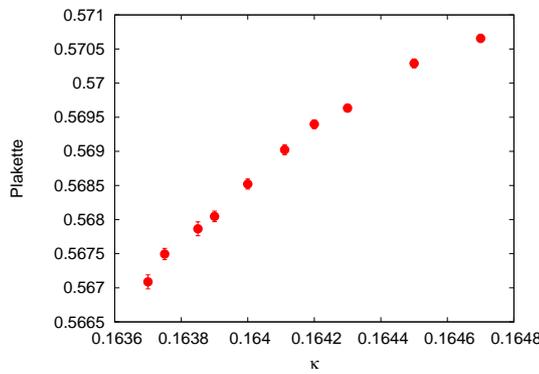


Abbildung 7.20: Erwartungswert der Plakette in Abhängigkeit von κ bei $\beta = 3.8$ und $\mu = 0.018$.

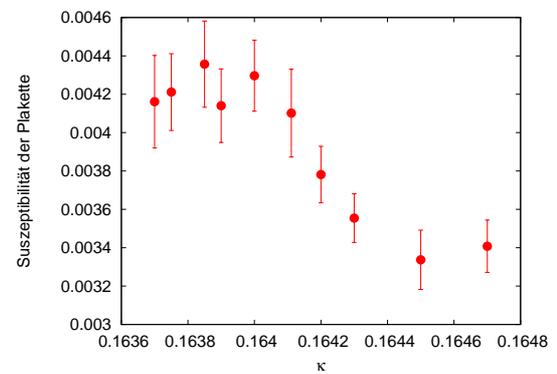


Abbildung 7.21: Suszeptibilität der Plakette in Abhängigkeit von κ bei $\beta = 3.8$ und $\mu = 0.018$.

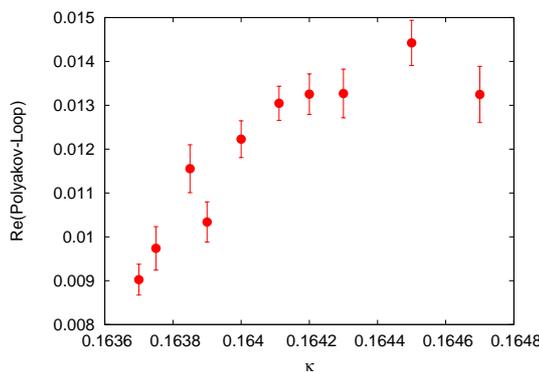


Abbildung 7.22: Realteil des Polyakov-Loops in Abhängigkeit von κ bei $\beta = 3.8$ und $\mu = 0.018$.

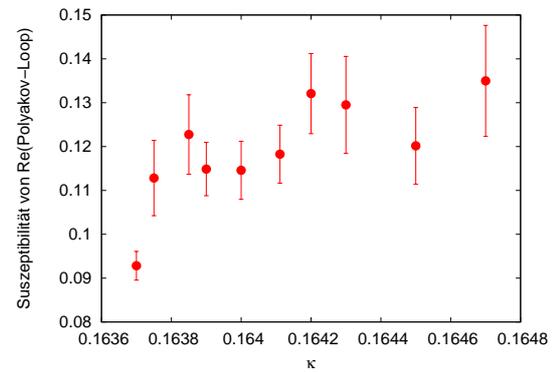


Abbildung 7.23: Suszeptibilität des Realteils des Polyakov-Loops in Abhängigkeit von κ bei $\beta = 3.8$ und $\mu = 0.018$.

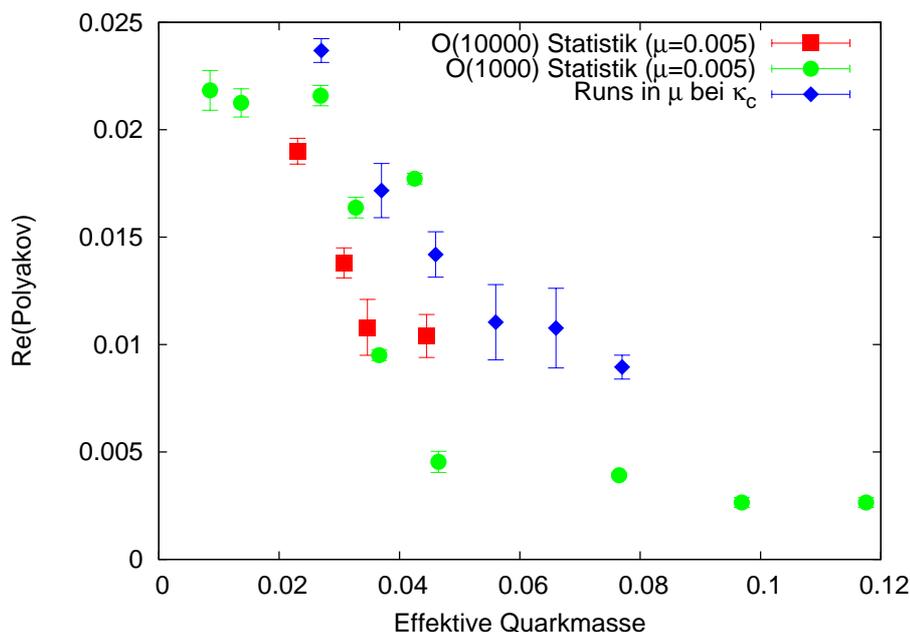


Abbildung 7.24: Vergleich von Daten bei verschiedenen (κ, μ) -Paaren bei $\beta = 3.9$. κ und μ wurden benutzt um gemäß Gleichung (7.7) eine effektive Quarkmasse zu erhalten.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Simulationsergebnisse einen Verlauf der thermischen Übergangslinie $\kappa_T(\mu)$ bei festem β wie in Abbildung 7.6 möglich erscheinen lassen, während die konische Struktur abweichend von Gleichung (7.7) stark aufgebogen sein müsste. Bei maximaler chiraler Verdrehung liegt der thermische Übergang offenbar bei einer größeren Quarkmasse als bei verschwindendem bzw. kleinem Verdrehungswinkel.

8. Zusammenfassung und Ausblick

Gegenstand dieser Arbeit sind die Eigenschaften der *twisted mass QCD* bei endlichen Temperaturen. Nach der Einleitung (Kapitel 1) werden dazu zunächst die nötigen Grundlagen zusammengetragen. Kapitel 2 behandelt einige Aspekte der Kontinuumsformulierung der QCD und insbesondere die Berechnung thermischer Erwartungswerte, wohingegen in Kapitel 3 die gitterregularisierte QCD mit Wilson'schen Fermionen vorgestellt wird. Darauf aufbauend wird in Kapitel 4 die tmQCD als alternative Gitterregularisierung auf Basis der Wilson'schen Fermionformulierung eingeführt. Hierbei ist von besonderer Bedeutung, dass man für volle chirale Verdrehung eine automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung erhält. Allerdings ist die tmQCD durch Gitterartefakte in Form einer nichttrivialen Phasenstruktur bei verschwindender Temperatur beeinträchtigt. Einen Zugang, um Aussagen über das Verhalten der tmQCD machen zu können, bilden neben der Schwachkopplungsentwicklung Monte-Carlo-Simulationen. Einige diesbezügliche Grundlagen finden sich in Kapitel 5, bevor die in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse in den Kapiteln 6 und 7 vorgestellt und diskutiert werden.

Kapitel 6 behandelt das Verhalten bei schwacher bzw. verschwindender Kopplung. Aus dem freien Propagator erhält man dabei die freie Dispersionsrelation $E(\mathbf{p})$, die deutlich kleinere Abweichungen vom Kontinuumsverhalten bei maximaler Verdrehung als im Fall reiner Wilson-Fermionen aufweist. Bei endlichen Temperaturen wird der Druck p bzw. die dimensionslose Größe p/T^4 betrachtet. Diese Größe weist für $\mathcal{O}(g^0)$ keine Diskretisierungseffekte in der ersten Ordnung des Gitterabstandes auf. Dadurch verliert die automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung ihre Bedeutung. Vielmehr ist zu klären, ob nicht die $\mathcal{O}(a^2)$ -Effekte der tmQCD bei vollem *twist* sehr viel größer sind als bei verschwindender Verdrehung. Dies kann aufgrund der gemachten Untersuchungen im Stefan-Boltzmann-Grenzwert ausgeschlossen werden; die $\mathcal{O}(a^2)$ -Effekte sind zwar vom Verdrehungswinkel abhängig, variieren aber nur schwach und bleiben so stets von einer vergleichbaren Größe. Die in $\mathcal{O}(g^2)$ gefundene Verbesserung bei maximaler Verdrehung ist marginal, d. h. der Einfluss der $\mathcal{O}(a)$ -Effekte in dieser Ordnung ist vorhanden aber klein.

Aus den Ergebnissen wird deutlich, dass *staggered* Fermionen bei endlichem Gitterabstand deutlich kleinere Abweichungen vom Kontinuumsverhalten zeigen als die Wilson'sche bzw. tmQCD-Formulierung. Somit lässt sich festhalten, dass die tmQCD den Nachteil der Wilson-Fermionen gegenüber denen vom *staggered* Typ nicht aufhebt. Untersuchungen mit Wilson'schen Fermionen behalten damit auch mit der Modifikation des chiral verdrehten Massenterms v. a. Bedeutung als Kontrolle und Absicherung der Resultate, die sich mit *staggered* Fermionen schneller erzielen lassen. Während der Vergleich mit den *staggered* Fermionen skeptisch zu betrachten ist, bedeutet die automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung sicherlich einen Vorteil gegenüber den reinen Wilson-Fermionen.

Ein nichtperturbatives Problem der tmQCD, das mit GHMC-Simulationen untersucht worden ist, ist die Phasenstruktur im (κ, β, μ) -Raum, die in Kapitel 7 diskutiert wird. Für physikalische Probleme z. B. im Bezug auf die thermische Übergangstempe-

ratur oder die Zustandsgleichung ist dabei der Bereich in Richtung des Kontinuumslimites von besonderem Interesse. Reine Wilson-Fermionen besitzen dort eine thermische Übergangslinie $\kappa_T(\beta)$. Eine eben solche Übergangslinie ist hier auch für einen nichtverschwindenden Wert des chiral verdrehten Massenterms $\mu = 0.005$ gefunden worden.

Creutz hat ein Modell vorgeschlagen, das für einen festen Wert der inversen Kopplung β geschlossene Linien gleicher Physik in der jeweiligen (κ, μ) -Ebene vorhersagt. Die für diese Arbeit durchgeführten Simulationen, hauptsächlich bei $\beta = 3.8$, deuten darauf hin, dass diese Linien stark aufgebogen sind. Der thermische Übergang liegt bei maximaler Verdrehung bei einer deutlich größeren Masse, als nach der Modellvorstellung zu erwarten wäre. Um zu einem klaren Bild über die thermische Phasenstruktur zu gelangen, fehlen insbesondere noch Ergebnisse für den Bereich $\kappa > \kappa_c$. Aus den bisher erzielten Daten lässt sich vermuten, dass die thermische Übergangslinie $\kappa_T(\mu)$ bei festem β auch für $\kappa > \kappa_c$ weiter ansteigt und bei größeren Werten des Hopping-Parameters durch Dopplerartefakte in einer noch unklaren Weise beeinflusst wird. Erst viel näher zum Kontinuumslimites würde dann Creutz' Bild zunehmend Gültigkeit erlangen.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die tmQCD für Untersuchungen bei endlichen Temperaturen durchaus geeignet ist und gewisse Vorteile gegenüber nicht verdrehten Wilson-Fermionen bietet: Die automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung zeigt zwar im Schwachkopplungsregime für den Druck nur kleine Effekte, kann aber für andere Observablen durchaus von größerer Relevanz sein. Darüberhinaus sind die Funktion als infraroter Regulator und die multiplikative Renormierung des chiral verdrehten Massenterms μ zu nennen. Vor der Verwendung für physikalische Fragestellungen bei endlichen Temperaturen muss allerdings die Phasenstruktur noch besser verstanden werden. Ein Aspekt ist hierbei der oben diskutierte Verlauf der thermischen Übergangslinie in einer festen (κ, μ) -Ebene, der abschließend geklärt werden sollte. Ferner ist aber gerade der thermische Übergang in β -Richtung, der bisher nicht untersucht worden ist, von Bedeutung, da physikalische Untersuchungen aller Voraussicht nach in dieser Richtung verlaufen werden. Dies hängt zum einen damit zusammen, dass durch β bzw. über den Gitterabstand $a(\beta)$ im Wesentlichen die Temperatur geregelt wird. Zum anderen steht in diese Richtung die Methode von Ferrenberg und Swendsen [78] zur Verfügung, die eine bessere Ausnutzung der erhaltenen Monte-Carlo-Daten erlaubt.

Alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen betreffen den Fall eines massenentarteten Quarkdoublets. Da die Masse des *strange*-Quarks aber etwa im Bereich des thermischen Übergangs liegt, sollte ein Fernziel der Verwendung der tmQCD sein, den thermischen Übergang unter Einbeziehung zumindest eines weiteren, nichtentarteten Quarks zu untersuchen. Für $T = 0$ werden bereits entsprechende Formulierungen der tmQCD betrachtet. Aber auch für den Fall $n_f = 2$ gibt es mit der Universalitätsklasse des thermischen Übergangs im chiralen Grenzfall noch eine offene Frage, zu deren Untersuchung die tmQCD herangezogen werden kann.

A. Anhang

A.1. Verwendete Konventionen und Abkürzungen

A.1.1. Einheitensystem

Es werden natürliche Einheiten mit $\hbar = c = k_B = 1$ verwendet. Die Umrechnung in andere Einheitensysteme erfolgt mittels der nachfolgend angegebenen Werte, die aus [79] entnommen sind:

$$\hbar c = 197.326968(17) \text{ MeV fm} \quad (\text{A.1})$$

$$c = 299792458 \text{ m s}^{-1} \quad (\text{A.2})$$

$$k_B = 8.617343(15) \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1} \quad (\text{A.3})$$

Damit entsprechen 100 MeV einer Temperatur von 10^{12} K.

Bei der Gitterformulierung wird in den meisten Fällen der Gitterabstand $a = 1$ gesetzt, da auf dem Gitter ohnehin nur dimensionslose Parameter von Bedeutung sind. Um von den Gitterparametern zurück auf dimensionsbehaftete Größen zu transformieren, müssen die Größen mit den entsprechenden Potenzen des Gitterabstandes a multipliziert werden, um die richtige Massendimension zu erhalten.

A.1.2. Euklidische Raumzeit

Ein Minkowski-Vektor $x = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ wird durch Wickrotation in der Zeit in den euklidischen Vektor $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ überführt [8, Kap. 1.3]. Dabei gilt der Zusammenhang $x_0 = -ix_4$. Räumliche Vektoren werden als $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ abgekürzt. Die euklidische Metrik wird durch das Kronecker-Symbol $\delta_{\mu\nu}$ angegeben. Für die Dirac'schen γ -Matrizen gilt im Euklidischen [8, Kap. 8.1.2]:

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}\mathbf{1} \quad (\text{A.4})$$

A.1.3. Summenkonvention

Das Auftreten zweier gleicher Indizes impliziert die Summenkonvention. Ausgenommen davon sind Raumzeit-Indizes für Gittergrößen, für die die Summen stets explizit ausgeschrieben werden.

A.1.4. Integration bei endlichen Temperaturen

$$\int_\beta d^4x = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \quad (\text{A.5})$$

A.1.5. Impulsintegration auf einem räumlich unendlichen Gitter

$$\int_p f(p) = \int_{[0,2\pi)^3} \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} f(\mathbf{p}, -\omega_n) - \int_{[0,2\pi)^4} \frac{d^4p}{(2\pi)^4} f(\mathbf{p}, p_4) \quad (\text{A.6})$$

Das Integral ist normiert auf den Wert 0 bei verschwindender Temperatur, d. h. $N_t \rightarrow \infty$.

A.1.6. Gitterimpulse

$$\hat{p}_\mu = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{ap_\mu}{2}\right) \quad \bar{p}_\mu = \frac{1}{a} \sin(ap_\mu) \quad (\text{A.7})$$

A.2. Übersicht über die Simulationen

Alle Simulationen wurden mit dem zur Verfügung stehenden GHMC Code [58] auf den apeNEXT in Rom (vgl. [68]) durchgeführt. Die Gittergröße war jeweils $16^3 \times 8$. Im Folgenden wird die erreichte Statistik für die verschiedenen Parameterkombinationen angegeben.

A.2.1. Simulationen zu Abschnitt 7.3.1

β	κ	μ	Statistik	β	κ	μ	Statistik
3.75	0.1640	0.005	5000	3.775	0.1640	0.005	14491
3.75	0.1644	0.005	5000	3.775	0.1642	0.005	13992
3.75	0.1648	0.005	10000	3.775	0.1644	0.005	15988
3.75	0.1652	0.005	10000	3.775	0.1646	0.005	14968
3.75	0.1656	0.005	10477	3.775	0.1648	0.005	16033
3.75	0.1657	0.005	10477	3.775	0.1652	0.005	10000
3.75	0.1658	0.005	10000	3.775	0.1656	0.005	12744
3.75	0.1660	0.005	10776	3.775	0.1660	0.005	2243
3.75	0.1671	0.005	5000				
3.75	0.1677	0.005	5000				
β	κ	μ	Statistik				
3.8	0.1625	0.005	20956				
3.8	0.1627	0.005	19980				
3.8	0.1629	0.005	19980				
3.8	0.1631	0.005	19980				
3.8	0.1633	0.005	19980				
3.8	0.1635	0.005	19980				
3.8	0.1637	0.005	21976				
3.8	0.1639	0.005	21976				
3.8	0.1641	0.005	15489				
3.8	0.1643	0.005	4988				

A.2.2. Simulationen zu Abschnitt 7.3.2

β	κ	μ	Statistik	β	κ	μ	Statistik
3.8	0.164111	0.010	6750	3.8	0.1637	0.018	11000
3.8	0.164111	0.011	5500	3.8	0.16375	0.018	18000
3.8	0.164111	0.012	7000	3.8	0.16385	0.018	14550
3.8	0.164111	0.014	20000	3.8	0.1639	0.018	20000
3.8	0.164111	0.0153	8750	3.8	0.1640	0.018	21250
3.8	0.164111	0.0166	12750	3.8	0.164111	0.018	20000
3.8	0.164111	0.018	20000	3.8	0.1642	0.018	19500
3.8	0.164111	0.0193	10000	3.8	0.1643	0.018	20000
3.8	0.164111	0.0206	11250	3.8	0.1645	0.018	11250
3.8	0.164111	0.022	20000	3.8	0.1647	0.018	12500
3.8	0.164111	0.026	20000				
3.8	0.164111	0.030	15500				
<hr/>							
β	κ	μ	Statistik				
3.9	0.160856	0.0085	500				
3.9	0.160856	0.0170	500				
3.9	0.160856	0.0270	2000				
3.9	0.160856	0.0370	2000				
3.9	0.160856	0.0460	2000				
3.9	0.160856	0.0560	2000				
3.9	0.160856	0.0660	2000				
3.9	0.160856	0.0770	2000				
3.9	0.160856	0.0870	500				
3.9	0.160856	0.0970	500				

Literaturverzeichnis

- [1] PHILIPSEN, O.: *Exploring the QCD phase diagram*. arXiv:0710.1217 [hep-ph].
- [2] PHILIPSEN, O.: *Lattice QCD at finite temperature and density*. arXiv:0708.1293 [hep-lat].
- [3] FORCRAND, P. DE, S. KIM und O. PHILIPSEN: *A QCD chiral critical point at small chemical potential: is it there or not?* PoS(Lat2007)178. [arXiv:0711.0262 [hep-lat]].
- [4] *Homepage des CBM Experiments an der GSI (FAIR)*, 23. Oktober 2007. <http://www.gsi.de/fair/experiments/CBM/1intro.html>.
- [5] LAERMANN, E. und O. PHILIPSEN: *Status of lattice QCD at finite temperature*. Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 53 163-198, 2003. [arXiv:hep-ph/0303042].
- [6] AOKI, Y., Z. FODOR, S. D. KATZ und K. K. SZABO: *The QCD transition temperature: Results with physical masses in the continuum limit*. Phys. Lett. B643 46-54, 2006. [arXiv:hep-lat/0609068].
- [7] FODOR, Z.: *QCD Thermodynamics*. PoS(Lat2007)011. [arXiv:0711.0336 [hep-lat]].
- [8] MONTVAY, I. und G. MÜNSTER: *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, Cambridge, 1994. Cambridge Monographs on Mathematical Physics.
- [9] ALI KHAN, A. et al.: *Phase structure and critical temperature of two flavor QCD with renormalization group improved gauge action and clover improved Wilson quark action*. Phys. Rev. D63 034502, 2001. [arXiv:hep-lat/0008011].
- [10] ALI KHAN, A. et al.: *Equation of state in finite-temperature QCD with two flavors of improved Wilson quarks*. Phys. Rev. D64 074510, 2001. [arXiv:hep-lat/0103028].
- [11] BORNIAKOV, V. G., S. M. MOROZOV, M. I. POLIKARPOV, G. SCHIERHOLZ und T. SUZUKI: *Finite temperature Lattice QCD with two flavors of improved Wilson fermions*. PoS(Lat2007)171. [arXiv:0711.1427 [hep-lat]].
- [12] CREUTZ, M.: *Why rooting fails*. PoS(Lat2007)007. [arXiv:0708.1295 [hep-lat]].
- [13] KRONFELD, A.: *Lattice gauge theory with staggered fermions: how, where, and why (not)*. PoS(Lat2007)016. [arXiv:0711.0699 [hep-lat]].

- [14] SHINDLER, A.: *Twisted mass lattice QCD*. arXiv:0707.4093 [hep-lat].
- [15] URBACH, C.: *Lattice QCD with two light Wilson quarks and maximal twist*. PoS(LAT2007)022.
- [16] ILGENFRITZ, E.-M., K. JANSEN, M. P. LOMBARDO, M. MÜLLER-PREUSSKER, O. PHILIPSEN, A. STERNBECK und I. WETZORKE: *Twisted mass QCD thermodynamics: First results on apeNEXT*. PoS(Lat2006)140. [arXiv:hep-lat/0610112].
- [17] ILGENFRITZ, E.-M., K. JANSEN, M. P. LOMBARDO, M. MÜLLER-PREUSSKER, M. PETSCHLIES, O. PHILIPSEN, A. STERNBECK und L. ZEIDLEWICZ: *Twisted mass QCD at finite temperature*. PoS(Lat2007)238. [arXiv:0710.0569 [hep-lat]].
- [18] GELL-MANN, M.: *A Schematic Model of Baryons and Mesons*. Phys. Lett. 8 214-215, 1964.
- [19] ZWEIG, G.: *An SU(3) model for strong interaction symmetry and its breaking*. CERN-TH-401, CERN-TH-412, 1964. Publiziert in „Developments in the Quark Theory of Hadrons“. Vol. 1. Hrsg. D. Lichtenberg und S. Rosen. Nonantum, Mass., Hadronic Press, 1980.
- [20] RYDER, L. H.: *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, Cambridge, 2. Auflage, 1996.
- [21] PESKIN, M. E. und D. V. SCHROEDER: *An Introduction to quantum field theory*. Addison-Wesley, Reading, USA, 1995.
- [22] SCHWINGER, J. (HRSG.): *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*. Dover Publications, New York, 1958.
- [23] YANG, C. N. und R. L. MILLS: *Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance*. Phys. Rev. 96 191-195, 1954.
- [24] GROSS, D. J. und F. WILCZEK: *Ultraviolet Behavior of Non-Abelian Gauge Theories*. Phys. Rev. Lett. 30 1343-1346, 1973.
- [25] POLITZER, H. D.: *Reliable Perturbative Results For Strong Interactions?* Phys. Rev. Lett. 30 1346-1349, 1973.
- [26] *LHC Homepage*, 23. Oktober 2007. <http://lhc.web.cern.ch/lhc/>.
- [27] SALAM, A.: *Gauge Unification of Fundamental Forces*. Rev. Mod. Phys. 52 525-538, 1980. 1979 Nobel lecture.
- [28] WEINBERG, S.: *Conceptual Foundations of the Unified Theory of Weak and Electromagnetic Interactions*. Rev. Mod. Phys. 52 515-523, 1980. 1979 Nobel lecture.
- [29] FEYNMAN, R. P.: *Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics*. Rev. Mod. Phys. 20 367-387, 1948.

-
- [30] SCHWABL, F.: *Statistische Mechanik*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2. Auflage, 2004.
- [31] KAPUSTA, J. I. und C. GALE: *Finite-Temperature Field Theory. Principles and Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, New York, 2. Auflage, 2006.
- [32] FADDEEV, L. D. und V. N. POPOV: *Feynman diagrams for the Yang-Mills field*. Phys. Lett. B25 29-30, 1967.
- [33] WILSON, K. G.: *Confinement of Quarks*. Phys. Rev. D10 2445-2459, 1974.
- [34] GUPTA, R.: *Introduction to lattice QCD*. Les Houches 1997, Probing the standard model of particle interactions, Pt. 2, Seiten 83–219. [arXiv:hep-lat/9807028].
- [35] ROTHE, H. J.: *Lattice gauge theories: An Introduction*. World Scientific Lecture Notes in Physics – Vol. 43, Singapur, 1992.
- [36] WEISZ, P.: *Continuum Limit Improved Lattice Action for Pure Yang-Mills Theory. 1*. Nucl. Phys. B212 1-17, 1983.
- [37] WEISZ, P. und R. WOHLERT: *Continuum Limit Improved Lattice Action for Pure Yang-Mills Theory. 2*. Nucl. Phys. B236 397-422, 1984.
- [38] NIELSEN, H. B. und M. NINOMIYA: *Absence of Neutrinos on a Lattice*. Nucl. Phys. B185 20-40, Nucl. Phys. B193 173-193, 1981.
- [39] AOKI, S.: *New phase structure for lattice QCD with Wilson fermions*. Phys. Rev. D30 2653-2663, 1984.
- [40] AOKI, S.: *Solution to the $U(1)$ problem on a lattice*. Phys. Rev. Lett. 57 3136-3139, 1986.
- [41] ILGENFRITZ, E.-M., W. KERLER, M. MÜLLER-PREUSSKER, A. STERNBECK und H. STÜBEN: *A numerical reinvestigation of the Aoki phase with $N(f) = 2$ Wilson fermions at zero temperature*. Phys. Rev. D69 074511, 2004. [arXiv:hep-lat/0309057].
- [42] CAPITANI, S.: *Lattice perturbation theory*. Phys. Rept. 382 113-302, 2003. [arXiv:hep-lat/0211036].
- [43] HELLER, U. M., F. KARSCH und B. STURM: *Improved staggered fermion actions for QCD thermodynamics*. Phys. Rev. D60 114502, 1999. [arXiv:hep-lat/9901010].
- [44] FREZZOTTI, R., P. A. GRASSI, S. SINT und P. WEISZ: *A local formulation of lattice QCD without unphysical fermion zero modes*. Nucl. Phys. Proc. Suppl. 83 941-946, 2000. [arXiv:hep-lat/9909003].
- [45] FREZZOTTI, R., P. A. GRASSI, S. SINT und P. WEISZ: *Lattice QCD with a chirally twisted mass term*. JHEP 08:058, 2001. [arXiv:hep-lat/0101001].

- [46] FREZZOTTI, R. und G. C. ROSSI: *Chirally improving Wilson fermions. I: $O(a)$ improvement*. JHEP 08:007, 2004. [[arXiv:hep-lat/0306014](#)].
- [47] SINT, S.: *Lattice QCD with a chiral twist*. [hep-lat/0702008](#).
- [48] FREZZOTTI, R.: *Wilson fermions with chirally twisted mass*. Nucl. Phys. Proc. Suppl. 119 140-148, 2003. [[arXiv:hep-lat/0210007](#)].
- [49] URBACH, C.: *Wilson Twisted Mass Fermions: Towards Realistic Simulations of Lattice-QCD*, 2005. Dissertation. Freie Universität Berlin, Fachbereich Physik.
- [50] AOKI, S. und O. BÄR: *Automatic $O(a)$ improvement for twisted-mass QCD*. PoS(Lat2006)165. [[arXiv:hep-lat/0610098](#)].
- [51] AOKI, S. und O. BÄR: *Automatic $O(a)$ improvement for twisted-mass QCD in the presence of spontaneous symmetry breaking*. Phys. Rev. D74 034511, 2006. [[arXiv:hep-lat/0604018](#)].
- [52] SYMANZIK, K.: *Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 1.,2*. Nucl. Phys. B226 187-204, 205-227, 1983.
- [53] LÜSCHER, M., S. SINT, R. SOMMER und P. WEISZ: *Chiral symmetry and $O(a)$ improvement in lattice QCD*. Nucl. Phys. B478 365-400, 1996. [[arXiv:hep-lat/9605038](#)].
- [54] JANSEN, K. und C. URBACH: *First results with two light flavours of quarks with maximally twisted mass*. PoS(Lat2006)203. [[arXiv:hep-lat/0610015](#)].
- [55] SHARPE, S. R. und R. L. SINGLETON: *Spontaneous flavor and parity breaking with Wilson fermions*. Phys. Rev. D58 074501, 1998. [[arXiv:hep-lat/9804028](#)].
- [56] MÜNSTER, G.: *On the phase structure of twisted mass lattice QCD*. JHEP 09:035, 2004. [[arXiv:hep-lat/0407006](#)].
- [57] FARCHIONI, F. et al.: *Dynamical twisted mass fermions*. PoS(Lat2005)072. [[arXiv:hep-lat/0509131](#)].
- [58] URBACH, C., K. JANSEN, A. SHINDLER und U. WENGER: *HMC algorithm with multiple time scale integration and mass preconditioning*. Comput. Phys. Commun. 174 87-98, 2006. [[arXiv:hep-lat/0506011](#)].
- [59] DUANE, S., A. D. KENNEDY, B. J. PENDLETON und D. ROWETH: *Hybrid Monte Carlo*. Phys. Lett. B195 216-222, 1987.
- [60] BERG, B. A.: *Introduction to Markov Chain Monte Carlo Simulations and their Statistical Analysis*. World Scientific Publishing, Singapur, 2004. Kurzfassung in [arXiv:cond-mat/0410490](#).
- [61] HASENBUSCH, M.: *Speeding up the Hybrid-Monte-Carlo algorithm for dynamical fermions*. Phys. Lett. B519 177-182, 2001. [[arXiv:hep-lat/0107019](#)].
- [62] MCLERRAN, L. D. und B. SVETITSKY: *Quark liberation at high temperature: A Monte Carlo study of $SU(2)$ gauge theory*. Phys. Rev. D24 450-460, 1981.

- [63] BITAR, K. M., A. D. KENNEDY und P. ROSSI: *The chiral limit and phase structure of QCD with Wilson fermions*. Phys. Lett. B234 333-338, 1990.
- [64] KARSCH, F., E. LAERMANN und A. PEIKERT: *The pressure in 2, 2+1 and 3 flavour QCD*. Phys. Lett. B478 447-455, 2000. [arXiv:hep-lat/0002003].
- [65] BERNARD, C. W.: *Feynman Rules for Gauge Theories at Finite Temperature*. Phys. Rev. D9 3312-3320, 1974.
- [66] KAPUSTA, J. I.: *Quantum chromodynamics at high temperature*. Nucl. Phys. B148 461-498, 1979.
- [67] HAHN, T.: *CUBA - a library for multidimensional numerical integration*. Comput. Phys. Commun. 168: 78-95, 2005. [arXiv:hep-ph/0404043].
- [68] *Homepage des apeNEXT Projekts in Rom*, 19. November 2007.
http://apegate.roma1.infn.it/APE/index.php?go=/next_center.tpl.
- [69] FISHER, M. E.: *The theory of equilibrium critical phenomena*. Rep. Prog. Phys. 30 615-730, 1967.
- [70] MEYER-ORTMANN, H. und T. REISZ: *Principles of phase structures in particle physics*. World Scientific Lecture Notes in Physics – Vol. 77, Singapur, 2007.
- [71] LEE, T. D. und C. N. YANG: *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions*. Phys. Rev. 87 404-409, 410-419, 1952.
- [72] PHILIPSEN, O.: *The QCD phase diagram at zero and small baryon density*. PoS(Lat2005)016. [arXiv:hep-lat/0510077].
- [73] IWASAKI, Y.: *Phase diagram of QCD at finite temperatures with Wilson fermions*. Nucl. Phys. Proc. Suppl. 42 96-102, 1995. [arXiv:hep-lat/9412103].
- [74] AOKI, S., A. UKAWA und T. UMEMURA: *Finite temperature phase structure of lattice QCD with Wilson quark action*. Phys. Rev. Lett. 76 873-876, 1996. [arXiv:hep-lat/9508008].
- [75] ILGENFRITZ, E. M., W. KERLER, M. MÜLLER-PREUSSKER, A. STERNBECK und H. STÜBEN: *Probing the Aoki phase with $N(f) = 2$ Wilson fermions at finite temperature*. 2005. arXiv:hep-lat/0511059.
- [76] CREUTZ, M.: *Effective potentials, thermodynamics, and twisted mass quarks*. Phys. Rev. D76 054501, 2007. [arXiv:0706.1207 [hep-lat]].
- [77] BOUCAUD, P. et al.: *Dynamical twisted mass fermions with light quarks*. Phys. Lett. B650 304-311, 2007. [arXiv:hep-lat/0701012].
- [78] FERRENBURG, A. M. und R. H. SWENDSEN: *Optimized Monte Carlo data analysis*. Phys. Rev. Lett. 63 1195-1198, 1989.
- [79] YAO, W. M. et al.: *Review of Particle Physics*. Journal of Physics G 33, 2006. Particle Data Group: <http://pdg.lbl.gov>.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all jenen bedanken, die mich während meines Studiums und insbesondere während der Entstehung dieser Diplomarbeit unterstützt haben. Besonderen Dank schulde ich

- Herrn Professor Dr. O. Philipsen für die interessante Themenstellung und die stets aufgebraachte Zeit zur Betreuung dieser Arbeit.
- den Mitgliedern der tmfTQCD Kollaboration für die Möglichkeit an ihrem Projekt mitzuarbeiten, für den jederzeit verfügbaren Rat und insbesondere für die Bereitstellung des GHMC-Codes sowie der benötigten Rechenzeit. Speziell danke ich Dr. K. Jansen für die Hilfe bei der Einarbeitung in das Programm und Prof. Dr. M.P. Lombardo für die Hilfe bei der Koordination der apeNEXT-Rechnungen vor Ort in Rom.
- Dr. S. Capitani für den bereitwilligen Rat zur Fehlersuche bei der Störungsrechnung, die nun in Abschnitt 6.3 präsentiert wird.
- Bastian Brandt, Julia Hemesath und Marcus Tassler für das aufmerksame Korrekturlesen.
- wiederum Bastian Brandt für die angenehme Büroatmosphäre und viele anregende Diskussionen.
- meiner Familie für die unschätzbare Unterstützung während meines gesamten Studiums.
- Julia Hemesath dafür, dass sie mich mit steter Unterstützung durch mein gesamtes Studium begleitet hat.

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne Verwendung anderer als der hier angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Lars Zeidlewicz
Münster, 10. Januar 2008