

Friedrich-Schiller-Universität Jena

Physikalisch-Astronomische Fakultät
Theoretisch-Physikalisches Institut



seit 1558

Kritisches Verhalten des dreidimensionalen Gross-Neveu- und Thirring-Modells

Diplomarbeit

eingereicht von Dvin Galstian Pour
geboren am 24.10.1981 in Teheran

Gutachter:

1. Prof. Dr. Andreas Wipf, Jena
2. Prof. Dr. Holger Gies, Jena

Tag der Verleihung des Diploms:

To my parents...

Inhaltsverzeichnis

1 Prolog	6
2 Kritische Phänomene und Symmetriebrechung	8
2.1 Historisches zum Thema „Kritische Phänomene“	8
2.2 Ehrenfests Klassifizierung der Phasenübergänge	10
2.3 Landau-Theorie	10
2.4 Kritische Exponenten	12
2.5 Symmetriebrechung in der Quantenwelt	14
3 Gitterformulierung der Quantenfeldtheorie	16
3.1 Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik	16
3.2 Quantenfelder auf dem Gitter	18
3.3 Der Fall der Fermionen	20
3.4 SLAC-Ableitung	22
4 Monte-Carlo-Simulationen von Gittertheorien mit Fermionen	24
4.1 Monte-Carlo-Methoden: Ein Abriss	24
4.2 Hybrid-Monte-Carlo	26
4.3 Pseudofermionen und der rHMC-Algorithmus	27
4.4 Fehleranalyse: Jackknife-Methode	28
5 Chirale Symmetriebrechung in Vier-Fermi-Modellen	30
5.1 Chirale Symmetrie	30
5.2 Einführende Notizen zu Vier-Fermi-Modellen	32
5.3 Gross-Neveu-Modell	33
5.4 Thirring-Modell	39
6 Epilog	43
A Gamma-Matrizen	44
A.1 Grundlagen	44
A.2 Gruppentheoretische Betrachtungen	44
A.3 Gamma-Matrizen in 4 Dimensionen	45

B	Graßman-Algebra	46
B.1	Graßmann-Variablen	46
B.2	Integration über Graßmann-Variablen	46
B.3	Partielle Ableitung nach Graßmann-Variablen	48

1 | Prolog

... ich will verstehen, und wenn andere Menschen verstehen, im selben Sinne, wie ich verstanden habe, dann gibt mir das eine Befriedigung wie ein Heimatgefühl.

HANNAH ARENDT
Im Interview¹ mit Günter Gaus

Als der Urmensch ein Wassertröpfchen an einem Eiszapfen in seiner Höhle zum ersten Male sah, konnte er sich bestimmt nicht vorstellen, dass mit der Entdeckung dieses alltäglichen Naturphänomens eine wissenschaftliche Disziplin zustande kommen würde, mit der sich die klügsten Köpfe in den folgenden Millionen Jahren beschäftigen würden.

Unseres Wissens war der vorsokratische Naturphilosoph Thales² der Erste, der den Umwandlungen der Formprinzipien in der materiellen Welt in seiner Kosmologie eine große Bedeutung gegeben hat. In seiner *Metaphysik* schreibt Aristoteles, dass Thales das Wasser als das Prinzip oder *archê* alles Seienden betrachtet hat. Zur Begründung seiner These hatte Thales die stofflichen Änderungsprozesse, z. B. das Austrocknen der Leichen, vor Augen. Selbstverständlich konnte er die Verdampfung des Wassers bzw. anderer Flüssigkeiten in dem heutigen Sinne nicht erklären. Nichtsdestoweniger könnte man ihn als Urbegründer dieses Forschungsgebiets betrachten [2].

Tatsächlich hat unsere Bewunderung für die Änderungen der Formprinzipien während der vergangenen Jahrhunderte an Tiefe gewonnen und durch Abstraktion die Grenzen unserer Wissenschaft erweitert. Diese Arbeit – etwa 2500 Jahre nach Thales – ist der Untersuchung vom kritischen Verhalten der Vier-Fermi-Theorien in $(2 + 1)$ Raumzeitdimensionen gewidmet. Neben dem rein theoretischen Reiz, den diese Modelle per se besitzen, wurde das Thirring-Modell als eine effektive Theorie vorgeschlagen, die sowohl das Phasendiagramm von Cupraten in der supraleitenden Phase als auch die elektronischen Eigenschaften vom Graphen beschreibt [4].

Mit einem großen Sprung von der Antike werden wir im zweiten Kapitel die historische Entwicklung dieses Forschungsgebiets in der neuzeitlichen Wissenschaft erörtern. In diesem Rahmen gehen wir sowohl auf die kritischen Phänomene in der klassischen Physik als auch auf die Behandlung der Phasenübergänge in der Quantenfeldtheorie ein.

Zur Regularisierung des Unendlichkeitsproblems in der Quantenfeldtheorie führen wir ein Raumzeitgitter ein. Dementsprechend wird die Gitterfeldtheorie der Gegenstand des dritten Kapitels sein. Nachdem wir kurz auf den Pfadintegralformalismus in der Quantenmechanik eingegangen sind, werden hier die Grundlagen der Gittertheorie am Beispiel eines reellen skalaren Feldes diskutiert. Des Weiteren werden die Formulierung der Fermionen auf dem Raumzeitgitter und dadurch entstehende Probleme, und zwar das Verdoppelungs- bzw. Vorzeichenproblem erläutert. Eine kurze Besprechung der möglichen Lösungsansätze folgt. Im Anschluss diskutieren

¹Das Interview wurde 1964 im Rahmen der Sendung „Zur Person“ durchgeführt. Die Videoaufnahme ist unter www.openculture.com/2013/07/hannah-arendt-1964-tv-interview.html zu sehen. Eine Niederschrift im Englischen wurde in dem Büchlein „The Portable Hannah Arendt“ [1] veröffentlicht.

²Thales von Milet (* um 624 v. Chr.; † um 546 v. Chr.), eine der Sieben Weisen, hat sich mit Astronomie, Meteorologie und Mathematik beschäftigt. Laut Herodot soll er die Sonnenfinsternis von 585 v. Chr. vorhersagt haben [2, 3].

wir die in dieser Arbeit verwendete SLAC-Ableitung.

Wie erwähnt, verwendet man den von Feynman entwickelten Pfadintegralformalismus, um die Erwartungswerte der physikalischen Größen in der Gitterfeldtheorie zu berechnen. Nach einer Wick-Rotation wird die Analogie zwischen der Quantenfeldtheorie und der statistischen Physik manifest. Als das wichtigste Werkzeug bei statistischen Untersuchungen stehen uns die Monte-Carlo-Methoden zur Verfügung. Nach einer kurzen Einführung der Monte-Carlo-Techniken diskutieren wir im vierten Kapitel den uns speziell in dieser Arbeit interessierenden rHMC-Algorithmus für Fermionen.

Im fünften Kapitel führen wir die chirale Symmetrie ein. Nach einer allgemeinen Darstellung der wichtigsten Merkmale der Vier-Fermi-Theorien, werden wir das Gross-Neveu- bzw. das Thirring-Modell als Hauptgegenstände unserer Untersuchungen im Detail diskutieren. Nachdem die theoretischen Grundlagen und technischen Details dargelegt wurden, gehen wir schließlich auf die Ergebnisse der Simulationen ein. Darauffolgend werden wir diese diskutieren und mit den bisher in der Literatur veröffentlichten Ergebnissen vergleichen. Eine Überlegung über weitere interessante Fragestellungen in der Zukunft schließt die Arbeit ab.

2 | Kritische Phänomene und Symmetriebrechung

2.1. Historisches zum Thema „Kritische Phänomene“

Gegen Ende des 17. Jahrhunderts waren die thermodynamischen Untersuchungen mittels Wasserdampf auf ihrem Höhepunkt, die dann später im Laufe des 18. Jahrhunderts zur praktischen Vervollständigung von Dampfmaschinen führten. Insbesondere hat die Erfindung des Papin'schen¹ Topfs den Wissenschaftlern ein neues experimentelles Werkzeug zur Verfügung gestellt, mit dem man die physikalischen Vorgänge unter den bis dahin nicht erreichten hohen Drücken beobachten konnte [6].

In Folge seiner Beobachtungen hat Papin festgestellt, dass das Wasser unter hinreichend hohem Druck bei viel höheren Temperaturen, im Vergleich zu seinem Siedepunkt unter Normalbedingungen, in der flüssigen Form bleibt. Ein ähnliches Verhalten konnte man auch bei anderen Flüssigkeiten beobachten. Dies würde andererseits bedeuten, dass eine Verflüssigung von „permanenten Gasen“² durch die gleichzeitige Erniedrigung der Temperatur und Steigerung des Drucks möglich sei. Tatsächlich ließ der experimentelle Befund nicht lange auf sich warten. Im Jahre 1784 konnten Jean-François Clouet und Gaspard Monge das gasförmige Schwefeldioxid bei niedriger Temperatur und unter hohem Druck in die flüssige Phase umwandeln [7]. Das Experiment hatte zur Folge, dass die physikalische Unterscheidung zwischen den Gasen und dem Dampf verschwand [8]. Andere „permanente Gasen“ wie zum Beispiel Wasserstoff, Stickstoff und Sauerstoff wurden 1877 verflüssigt [7].

Nach diesen Feststellungen kam die Zeit, die Eigenschaften der Phasenübergänge zu untersuchen. Dabei wurde klar, dass es thermodynamische Zustände gibt, in denen mehrere Phasen der Materie gleichzeitig nebeneinander im Gleichgewicht existieren können.

Um einiges diesbezüglich zu verdeutlichen, betrachten wir im Folgenden ein YXT -System mit l verschiedenen Teilchenarten in jeder Phase. Der makroskopische Zustand des thermodynamischen Systems wird durch drei Zustandsgrößen $\{Y, X, T\}$ vollständig beschrieben, wobei T die Temperatur, Y die verallgemeinerte mechanische Kraft und X die dazugehörige verallgemeinerte konjugierte Verschiebung bezeichnet. Man beachte, dass T und Y intensive Größen sind, während X immer extensiv ist. In jeder Phase hängt das chemische Potential $\mu(T, Y, \chi_1, \dots, \chi_{l-1})$ von $l + 1$ unabhängige Variablen ab. Dabei bezeichnet χ_i den Stoffmengenanteil der i -ten Teilchenart [9].

Als erste Bedingung für ein Phasengleichgewicht müssen die koexistierenden r Phasen die gleichen Werte der Zustandsgrößen T und Y haben [10]. Darüber hinaus müssen die Gleichungen

$$\mu_i^I(Y, T, \chi_1^I, \chi_2^I, \dots, \chi_{l-1}^I) = \mu_i^{II}(Y, T, \chi_1^{II}, \chi_2^{II}, \dots, \chi_{l-1}^{II}) = \dots = \mu_i^r(Y, T, \chi_1^r, \chi_2^r, \dots, \chi_{l-1}^r) \quad (2.1)$$

¹Denis Papin (* 1647 - † 1712), FRS, französischer Arzt und Physiker, war Assistent von Christiaan Huygens in der Académie des Sciences in Paris und von Robert Boyle in London, sowie der Kurator der Experimente an der Royal Society in London. Seine bedeutendste Erfindung, den Papin'schen Topf (*steam digester*), hat er dem Publikum im Jahre 1679 bei einer Sitzung der Royal Society zum ersten Mal vorgestellt [5].

²Damals hat man daran geglaubt, dass Dampf und Gasen zwei verschiedene Formen der Materie sind [7].

für jede i -te Teilchenart erfüllt werden ($i = 1, \dots, l$). Demnach haben wir $l(r - 1)$ Gleichungen mit $2 + r(l - 1)$ Unbekannten. Eine Lösung ist nur in dem Fall vorhanden, wenn $r \leq l + 2$ [9].

Für ein reines *PVT*-System³ mit $l = 1$, zum Beispiel, können maximal drei Phasen in dem sogenannten *Tripelpunkt* in einem Gleichgewicht zueinander stehen. Dieser Zustand wird in dem *PT*-Diagramm durch einen isolierten Punkt dargestellt. Der geometrische Ort der Zustände, in denen zwei Phasen im Gleichgewicht sind, wird entsprechend durch eine Kurve, oft *Grenzkurve* genannt, beschrieben [10].

Im Rahmen seiner akustischen Untersuchungen hat der französische Physiker Charles Cagniard de la Tour 1822 herausgefunden, dass die Flüssigkeit-Gas-Koexistenzkurve im Phasendiagramm bei sehr hohen Temperaturen in einem gewissen Punkt endet. Jenseits dieses Punktes ist das System in einem *état particulier*⁴, in dem eine Unterscheidung zwischen dem flüssigen und dem gasförmigen Zustand nicht mehr möglich ist [6, 7]. Die heutige Bezeichnung dieses *kritischen* Zustandes stammt von einem Vortrag *über die Stetigkeit der flüssigen und gasförmigen Zustände der Materie* [8], den Thomas Andrews 1869 vor der Royal Society in London hielt. Der Endpunkt der Grenzkurve wird demzufolge der *kritische* Punkt genannt [10].

Im Jahre 1873 hat Johannes Diderik van der Waals in seiner Dissertation gezeigt, dass man die von Andrews für die Kohlensäure vorgeschlagene experimentelle Zustandsgleichung [8] durch eine Erweiterung des für die idealen Gase verwendeten Modells herleiten kann [7]. Seine Theorie war die Erste, die einen kritischen Zustand vorhersagt [11]. Bestimmt man die Zustandsgrößen T_{kr} , P_{kr} und V_{kr} im kritischen Punkt, kann man die reduzierten Größen

$$t = \frac{T}{T_{\text{kr}}}, \quad p = \frac{P}{P_{\text{kr}}}, \quad v = \frac{V}{V_{\text{kr}}},$$

eingeführen. Dann erfüllen alle durch die van der Waals-Gleichung beschriebenen klassischen Fluide die Zustandsgleichung

$$\left(p + \frac{3}{v^2}\right)(3v - 1) = 8t.$$

Diese erste durch das kritische Verhalten zustande gekommene Vereinheitlichung chemisch unterschiedlicher *PVT*-Systeme nennt man das *Gesetz der korrespondierenden Zustände* [9, 10]. Dieses Gesetz wurde als das wichtigste Nebenprodukt der van der Waals-Theorie in dem modernen physikalischen Kontext im Jahre 1945 von E. Guggenheim mithilfe ausführlicher experimentellen Daten bestätigt [12].

Phasenübergänge und kritisches Verhalten wurden seither in vielen anderen Materialien beobachtet. Im Zuge seiner Experimente mit Ferromagneten hat Pierre Curie 1895 entdeckt, dass diese Körper ihre magnetischen Eigenschaften oberhalb einer bestimmten Temperatur verlieren [11]. Der erste Hinweis auf die *Universalität* der kritischen Phänomene in a priori nicht-verbunden physikalischen Systemen stammt ebenfalls aus seiner Feder [7].

Weitere experimentelle Meilensteine in diesem Zusammenhang wurden am Anfang des 20. Jahrhunderts in Leiden gesetzt. Hier hat Heike Kamerlingh Onnes 1911 die Erscheinung einer supraleitenden Phase in Quecksilber bei tiefen Temperaturen nachgewiesen [9]. Die nächste wichtige Entdeckung in dieser Reihe wurde 1932 von W. E. Keesom, der Nachfolger von Onnes am Laboratorium in Leiden, gemacht [11]. Er hat nämlich gezeigt, dass He^4 unterhalb $T = 2$ K ein merkwürdiges Verhalten besitzt. Die spezifische Wärmekapazität bei diesem Phasenübergang von $\text{He}(\text{I})$ zu $\text{He}(\text{II})$ hat das berühmte λ -förmige Verhalten [9]. Im Anschluss daran hat P. Kapitza 1938 verkündet, dass He^4 unterhalb des λ -Punktes zu einer Supraflüssigkeit wird [13].

Der Vollständigkeit halber erwähnen wir am Ende dieses Teils, dass die Theoretiker ebenso große Beiträge zum allgemeinen Verständnis der kritischen Verhalten von physikalischen Systemen geleistet haben. Darunter sind zweifellos die Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells von L. Onsager sowie die Landau-Theorie der Phasenübergänge von großer Bedeutung [11]. Über diese und weitere theoretische Fortschritte werden wir später berichten.

³Dabei bezeichnet P den Druck und V das Volumen des Systems.

⁴Dies ist die ursprüngliche Bezeichnung von Ch. Cagniard de la Tour in seinen ersten Veröffentlichungen [7].

2.2. Ehrenfests Klassifizierung der Phasenübergänge

Die experimentellen Ergebnisse von Onnes und Keesom gaben P. Ehrenfest den Anlass, in seiner bahnbrechenden Veröffentlichung von 1933 über die *Phasenumwandlungen im ueblichen und erweiterten Sinn* [14] eine Klassifizierung der Phasenübergänge vorzuschlagen [11]. Hier versuchte er mit Hilfe der Gibbsschen freien Energie G eine *eigenthuemliche Erweiterung des Begriffes Phasenumwandlung* zu formulieren [14].

Zu diesem Zweck hat er das Verhalten der partiellen Ableitungen von $G(T, Y)$ eines reinen YXT -Systems nach T und Y betrachtet. Haben die n -ten Ableitungen

$$(\partial_T^n G)_Y \quad \text{und} \quad (\partial_Y^n G)_T$$

bei dem Übergang von einer zur anderen Phase einen Sprung, während alle Ableitungen niedrigerer Ordnung stetig sind, redet man von einem *Phasenübergang n -ter Ordnung* [9].

Als Prototypen für sein Modell hat Ehrenfest zunächst die *ueblichen* Umwandlungen wie beispielsweise den Gas-Flüssigkeit-Übergang in Betracht gezogen, bei dem schon die ersten Ableitungen kein stetiges Verhalten aufweisen. Diese Phasenübergänge erster Ordnung sind immer mit dem Austausch einer latenten Wärme verbunden. Dabei erfüllen die Änderungen von Y und T entlang der Grenzkurve die Clausius-Clapeyron-Gleichung [10].

Den λ -förmigen Sprung der spezifischen Wärmekapazität von He^4 hat Ehrenfest dagegen als Beispiel für einen Phasenübergang zweiter Ordnung angenommen und ein von Keesom experimentell geprüftes Analogon zur Clausius-Clapeyron-Gleichung für diesen Fall hergeleitet [14]. Im Gegensatz zur vorherigen Kategorie beobachtet man hier keine Übergangswärme [11].

Die Allgemeingültigkeit der Ehrenfestschen Klassifizierung wurde aber 1944 zum ersten Male bezweifelt, als L. Onsager die exakte Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes veröffentlichte [15]. Seine Behandlung des Problems zeigte, dass das Modell tatsächlich einen Phasenübergang besitzt, bei dem jedoch die zweite Ableitung der Gibbsschen freien Energie unendlich wird. In den 1950er Jahren wurde von L. Tisza sogar bestritten, dass der λ -Übergang von He^4 zu dem Ehrenfestschen Schema dazugehört. Seitdem hat es mehrere Versuche gegeben die ursprüngliche Klassifizierung zu überarbeiten und an neuere experimentelle Befunde anzupassen. Die von Ehrenfest etablierten Bezeichnungen werden trotzdem bis heute in den Lehrbüchern und der Fachliteratur vorwiegend gebraucht [11].

Eine letzte Bemerkung scheint an der Stelle angemessen zu sein. Da Ehrenfest sich das Leben am 25. September 1933 kurz nach der Veröffentlichung des oben genannten Papiers nahm, hatte er keine Gelegenheit, seine Arbeit anhand neuer theoretischer bzw. experimenteller Entdeckungen zu revidieren. Die zweite Bemerkung am Ende seines Artikels zeigt jedoch, inwieweit die größten Wissenschaftler die Schwächen ihrer Arbeit im Voraus sehen und diese zu beheben wünschen [14].

»Obwohl wir es fuer zweckmaessig halten auch bei Discontinuitaeten zweiter Ordnung von einer "Umwandlung einer Phase in eine andere" zu sprechen, scheint hier nicht moeglich zu sein, die beiden Phasen "raeumlich nebeneinander" im Gleichgewicht miteinander zu haben. Ich wuerde sehr wuenschen diesen charakteristischen Unterschied gegenueber der "gewoehnlichen" Phasenumwandlung besser formulieren und durchschauen zu koennen!«

Als eine Antwort auf Ehrenfests Wunsch haben L. D. Landau und E. Lifschitz eine eigene Klassifizierung 1938 in der ersten Auflage ihres Lehrbuchs über Statistische Physik [10] vorgestellt, die grundsätzlich auf dem Begriff der Symmetrie basiert [11]. Diese sowie die Landau-Theorie über die Phasenübergänge diskutieren wir im nächsten Abschnitt.

2.3. Landau-Theorie

Bei einem Phasenübergang zweiter Art ändern sich die thermodynamischen Zustandsgrößen *kontinuierlich*. Die Symmetrieeigenschaften des Körpers werden dagegen im Übergangspunkt sprunghaft geändert.

Bei einer Erniedrigung der Temperatur wird der *Ordnungsgrad* des Systems aufgrund der Kohäsionskräfte in den meisten Fällen größer. Dies hat zur Folge, dass die Hochtemperaturphase eine höhere und die andere eine niedrigere Symmetrie besitzt. Den Zustand mit der niedrigeren Symmetrie nennt man die *geordnete* Phase. Um diese quantitativ zu charakterisieren, führt man einen *Ordnungsparameter* ein [9, 10]. Zum Beispiel betrachten wir den Übergang vom paramagnetischen zum ferromagnetischen Zustand bei der Curie-Temperatur in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes. Oberhalb des Curie-Punktes hat das System eine Rotationsinvarianz. Verringert man die Temperatur, wird beim Erreichen der Curie-Temperatur ein Magnetisierungsvektor spontan auftauchen, der zugleich eine bevorzugte Richtung in das System einführt [9]. Im Allgemeinen kann eine Symmetrie in jedem Zeitpunkt entweder existieren oder nicht existieren. Das gleichzeitige Erscheinen zweier Phasen nebeneinander ist daher bei einem *kontinuierlichen*⁵ Übergang ausgeschlossen [10].

Per definitionem ist der Ordnungsparameter m in der geordneten Phase ungleich Null. Nähert sich das System dem Übergangspunkt an, wird m stetig kleiner. In der symmetrischen⁶ Phase muss der Ordnungsparameter verschwinden [10]. Dieses Verhalten vom Ordnungsparameter hat Landau verwendet, um das thermodynamische Potential des zu betrachtenden Körpers in der Nähe des Übergangspunktes in einer Potenzreihe nach m zu entwickeln

$$\phi(T, Y, m) = \phi_0(T, Y) + \alpha_1(T, Y)m + \alpha_2(T, Y)m^2 + \alpha_3(T, Y)m^3 + \alpha_4(T, Y)m^4 + \mathcal{O}(m^5).$$

Der in der Wirklichkeit beobachtete Wert des Ordnungsparameters ergibt ein Minimum vom Potential [9]. Da die Werte $m = 0$ und $m \neq 0$ beide in der Natur realisiert werden, muss das Glied erster Ordnung immer verschwinden: $\alpha_1 = 0$. Weiterhin muss man darauf achten, dass das

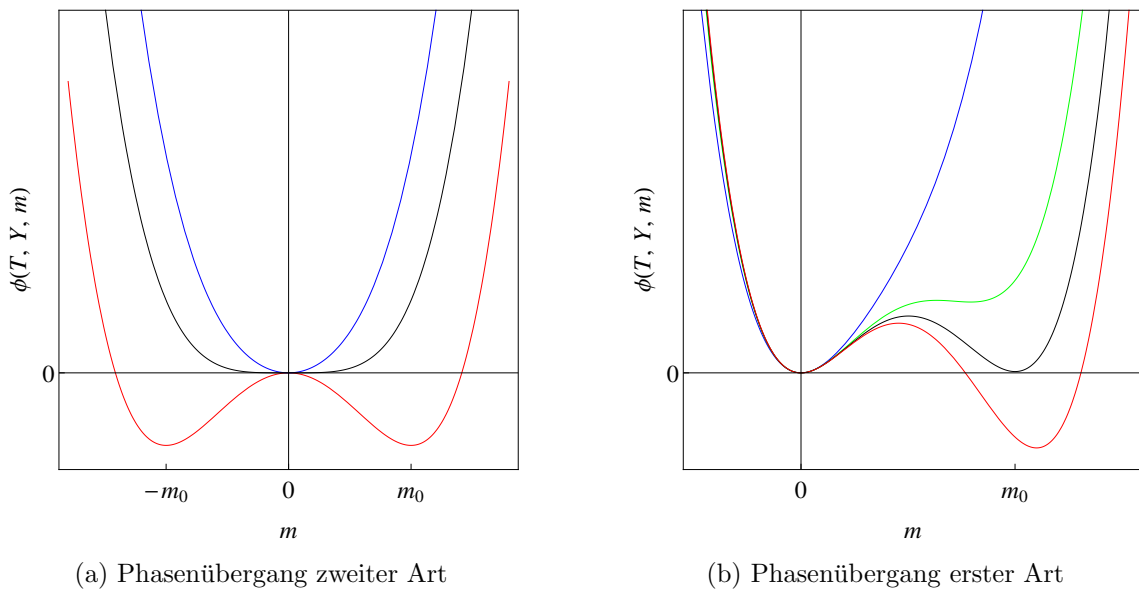


Abbildung 2.1.: (a) Der Verlauf eines Phasenübergangs zweiter Ordnung: Die blaue Kurve bezeichnet die symmetrische Phase. Erreicht das System den kritischen Punkt, weist die (schwarze) Potentialkurve ein Plateau auf. In dem geordneten Zustand kann das System zufällig einen der beiden durch die rote Kurve beschriebenen Werte des Ordnungsparameters annehmen. (b) Bei Phasenübergängen erster Ordnung ist ein nicht-verschwindendes Glied dritter Ordnung zugelassen. Dabei muss $\alpha_2 > 0$ und $\alpha_4 > 0$. In dem Fall springt der Wert von m im Übergangspunkt von 0 auf m_0 , wie man anhand der schwarzen Kurve sieht. Für $\alpha_3 < 0$ hat der Ordnungsparameter einen positiven Wert und vice versa.

⁵Die Phasenübergänge zweiter Art werden manchmal in der Literatur kontinuierliche Phasenübergänge genannt.

⁶Die Phase mit der höheren Symmetrie nennt man die symmetrische Phase, im Gegensatz zur anderen Phase mit der niedrigeren Symmetrie. Die Letztere wird oft die asymmetrische Phase genannt [10].

thermodynamische Potential eine skalare Größe ist. Somit sind nur invariante Kombinationen des Ordnungsparameters in dem Term dritter Ordnung zugelassen [9].

Zunächst betrachten wir den Fall der kontinuierlichen Übergänge, bei denen immer $\alpha_3 = 0$. In der symmetrischen Phase ist $\alpha_2 > 0$, weil ϕ in dem Punkt $m = 0$ ein Minimum haben muss. Geht man in den geordneten Zustand über, bezeichnen $\pm m_0 \neq 0$ die zwei Minima des thermodynamischen Potentials. Dies kann nur für $\alpha_2 < 0$ realisiert werden. Dementsprechend ist α_2 im Übergangspunkt gleich Null [10]. Um die globale Stabilität des Systems zu gewährleisten, ist überall $\alpha_4 > 0$ [9]. Dieser Zusammenhang wurde in der Abbildung 2.1a dargestellt.

Die obigen mathematischen Betrachtungen fassen wir zusammen, indem wir α_2 in der Form

$$\alpha_2(T, Y) = \alpha_0(T, Y) (T - T_{\text{kr}}(Y))$$

aufschreiben, wobei α_0 eine langsam veränderliche Funktion von T und Y ist. Das Potential ϕ hat Extrema, wenn

$$m = 0 \quad \text{oder} \quad m = \pm m_0 \equiv \pm \sqrt{\frac{-\alpha_2}{2\alpha_4}} = \pm \sqrt{\frac{\alpha_0}{2\alpha_4}} (T_{\text{kr}} - T).$$

Die Entropie $S = -(\partial_T \phi)_Y$ bleibt beim Übergang stetig

$$\lim_{T \rightarrow T_{\text{kr}}} \Delta S(T) = \frac{\alpha_0^2}{2\alpha_4} (T - T_{\text{kr}}) = 0.$$

Im Gegensatz dazu sagt die Theorie, wie erwartet, einen Sprung für die spezifische Wärmekapazität $c_Y = -T(\partial_T^2 \phi)_Y$ vorher⁷

$$\lim_{T \rightarrow T_{\text{kr}}} \Delta c_Y(T) = \frac{\alpha_0^2 T_{\text{kr}}}{2\alpha_4}.$$

Dieser Sprung hat das uns schon begegnete λ -förmige Verhalten im Übergangspunkt [9, 10].

Nachdem wir die Übergänge zweiter Ordnung diskutiert haben, lassen wir einen nicht-verschwindenden Wert des Gliedes dritter Ordnung zu. Der Ordnungsparameter ist in dem Fall ein Skalar oder ein Tensor, dessen Kontraktion in dritter Ordnung einen skalaren Wert besitzt. Einige Beispielkurven für ein solches System mit $\alpha_2 > 0$ und $\alpha_4 > 0$ wurden für verschiedene α_3 -Werte in der Abbildung 2.1b skizziert. Hier sieht man, dass der Wert des Ordnungsparameters im Übergangspunkt von 0 auf m_0 sprunghaft geändert wird. Dies passiert im Falle eines Phasenübergangs erster Ordnung, bei dem die Bedingungen $(\partial_m \phi)_{T,Y} = 0$ und $\phi(m_0) = \phi(0)$ erfüllt werden müssen [9]. Die zweite Bedingung stimmt mit der Vorschrift in (2.1) überein.

2.4. Kritische Exponenten

Nähert sich ein System dem kritischen Punkt an, beginnt es, sich durch Fluktuationen auf dem mikroskopischen Niveau in einer bestimmten Art und Weise langsam zu orientieren [16]. Dieses Verhalten beobachten wir durch die Erscheinung eines Ordnungsparameters. Im Übergangspunkt divergieren einige thermodynamische Funktionen. Die charakteristischen Eigenschaften dieser Singularitäten können wir bestimmen, indem wir den Begriff des kritischen Exponenten verwenden. Zunächst führen wir den Entwicklungsparameter

$$\varepsilon = \frac{T - T_{\text{kr}}}{T_{\text{kr}}}$$

ein, der den Abstand von dem kritischen Punkt in Form von reduzierten Variablen bezeichnet. Wir nehmen an, dass im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ jede thermodynamische Funktion $f(\varepsilon)$ einen *regulären*

⁷Bei dieser Rechnung hat man die Ableitungen von α_0 und α_4 nach T vernachlässigt, da diese als langsam veränderliche Funktionen von der Temperatur angenommen werden [9].

und einen *singulären* Anteil hat, der entweder selbst divergiert oder eine divergierende Ableitung besitzt. Der reguläre Anteil nimmt immer endliche Werte an, muss aber nicht unbedingt stetig sein [17]. Drückt man dies in mathematischer Sprache aus, schreibt man in der Umgebung des Übergangspunktes

$$f(\varepsilon) = A\varepsilon^\lambda (1 + B\varepsilon^y + \dots),$$

wobei A die Amplitude der Singularität im physikalischen Sinne ist. B und $y > 0$ sind konstante Koeffizienten. Der *kritische Exponent* für die Funktion $f(\varepsilon)$ definiert man als

$$\lambda \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\varepsilon)}{\ln \varepsilon}.$$

Hat λ einen negativen Wert, divergiert die Funktion $f(\varepsilon)$. In manchen Fällen wie beispielsweise $f(\varepsilon) = A|\ln \varepsilon| + B$ oder $f(\varepsilon) = A + B\varepsilon^{1/2}$ ist λ jedoch gleich Null. Dann definiert man den *modifizierten* kritischen Exponenten

$$\lambda' \equiv j + \frac{\ln |f^{(j)}(\varepsilon)|}{\ln \varepsilon},$$

wobei j die kleinste natürliche Zahl ist, für die die j -te Ableitung $f^{(j)}(\varepsilon)$ unendlich wird [9, 18].

Im Allgemeinen gibt es sechs wichtige kritische Exponenten, die mit griechischen Buchstaben $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$ bezeichnet werden. Die ersten vier definiert man wie folgt:

$$\begin{aligned} \text{Wärmekapazität:} & \quad c \propto |\varepsilon|^{-\alpha}, \\ \text{Ordnungsparameter:} & \quad m \propto |\varepsilon|^\beta, \\ \text{Suszeptibilität:} & \quad \chi \propto |\varepsilon|^{-\gamma}, \\ \text{Zustandsgleichung bei } \varepsilon = 0: & \quad m \propto h^{1/\delta}, \end{aligned}$$

wobei h das zum Ordnungsparameter m konjugierte äußere Feld darstellt. Die obigen Relationen zeigen die Proportionalität des singulären⁸ Anteils der Funktionen c , m und χ zu ε bzw. h . Des Weiteren betrachten wir die Korrelationsfunktion in der Ornstein-Zernicke-Form

$$\Gamma(r) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} r^{-p} e^{-r/\xi}.$$

und definieren die Exponenten ν und η in d Raumdimensionen

$$\begin{aligned} \text{Korrelationslänge:} & \quad \xi \propto |\varepsilon|^{-\nu}, \\ \text{Potenzgesetz bei } \varepsilon = 0: & \quad p = d - 2 + \eta, \end{aligned}$$

mit ξ als die Korrelationslänge des Systems [16]. Im Abschnitt 2.1 haben wir erwähnt, dass das Gesetz der korrespondierenden Zustände eine Vereinheitlichung von nicht-verwandten klassischen Fluiden zur Folge hat. Die kritischen Exponenten haben eine viel tiefere Bedeutung in diesem Sinne: zum einen erfüllen alle Systeme mit einem kritischen Verhalten die *Skalierungsgesetze*

$$\begin{aligned} \text{Fisher:} & \quad \gamma = \nu(2 - \eta), \\ \text{Rushbrooke:} & \quad \alpha + 2\beta + \gamma = 2, \\ \text{Widom:} & \quad \gamma = \beta(\delta - 1), \\ \text{Josephson:} & \quad \nu d = 2 - \alpha, \end{aligned}$$

zum anderen nehmen die kritischen Exponenten aller in einer *Universalitätsklasse* enthaltenen physikalischen Systeme laut der Theorie der Renormierungsgruppe gleiche Werte an. Es ist einfach zu sehen, dass lediglich zwei von den sechs Exponenten unabhängige Variablen sind. Die restlichen vier werden durch die Skalierungsgesetze bestimmt [17].

⁸Die Singularitäten weisen das gleiche Verhalten unabhängig davon auf, von welcher Seite sich das System dem kritischen Punkt annähert. Dies wurde sowohl theoretisch als auch experimentell bestätigt. Selbstverständlich gilt die Relation für den Ordnungsparameter nur in dem geordneten Zustand [17].

2.5. Symmetriebrechung in der Quantenwelt

Die Symmetrie eines Systems in der Hochtemperaturphase ist eng verbunden mit den Eigenschaften des Hamiltonians auf dem mikroskopischen Niveau. Im geordneten Zustand hat das System meistens mehrere *äquivalente* Grundzustände. Man kann es dann anhand einer Symmetrietransformation von einem in einen anderen Grundzustand überführen. In der Wirklichkeit wird jedes beliebige System jedoch *nur* in einem der o. g. Grundzustände realisiert. Es hat zur Folge, dass sich die Symmetrie des makroskopischen Körpers von der des mikroskopischen Hamiltonians unterscheidet. Dieses Phänomen nennt man *spontane Symmetriebrechung* [17].

Als einfaches Beispiel betrachten wir ein klassisches skalares Feld ϕ mit einer ϕ^4 -Wechselwirkung

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 - \frac{\lambda}{4!} \phi^4. \quad (2.2)$$

Für $m^2 > 0$ quantisiert man das Modell, indem man jeder Mode der klassischen Theorie einen quantenmechanischen harmonischen Oszillator zuordnet. Im Falle von $m^2 < 0$ funktioniert dieser Ansatz jedoch nicht. Ist $\lambda > 0$, stellt man fest, dass das Potential

$$V(\phi) = \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi^4 \quad (2.3)$$

bei $\phi_0 = \pm \sqrt{6m^2/\lambda}$ Minima hat (vgl. Landau-Theorie). In der Umgebung jedes der beiden Vakuumerwartungswerte ϕ_0 kann man (2.2) anhand $\phi = \phi_0 + \phi'$ umschreiben

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi')^2 + \frac{1}{2} (2m^2) \phi'^2 - \frac{\lambda \phi_0}{6} \phi'^3 - \frac{\lambda}{4!} \phi'^4 + \frac{3m^2}{2\lambda}. \quad (2.4)$$

Diese Lagrange-Dichte kann man kanonisch quantisieren. Es ist offensichtlich, dass die durch die Transformation $\phi \rightarrow -\phi$ erfüllte manifeste \mathbb{Z}_2 -Symmetrie von (2.2) in (2.4) nicht mehr vorhanden ist [19]. Jeder Grundzustand erzeugt einen eigenen Hilbertraum und somit sind Übergänge zwischen diesen Zuständen aufgrund einer *Super-Auswahlregel* verboten [17].

Eine spontane Symmetriebrechung kann man genauso gut bei Modellen mit einer kontinuierlichen Symmetrie beobachten, die uns nämlich zusätzliche Informationen über das System liefert. Für jede gebrochene kontinuierliche Symmetrie eines Lagrangians hat die „neue“ Theorie laut dem *Goldstone-Theorem*⁹ eine reduzierte Symmetrie und enthält ein masseloses Teilchen mit Spin Null [21]. Die *Goldstone-Bosonen* beobachtet man beispielsweise in Form von Phononen, sobald die Translationsinvarianz in einem Kristallgitter verletzt wird. Die Existenz von π -Mesonen in der QCD wird ebenfalls durch die spontane Brechung der chiralen Symmetrie erklärt [17].

In (2.3) hat man mit einem klassischen Potential zu tun. Zur Bestimmung der Vakuumerwartungswerte in der Quantenfeldtheorie bräuchten wir ein ähnliches Konstrukt, das uns wiederum eine geometrische Behandlung des Problems ermöglicht und gleichzeitig für die nötigen Quantenkorrekturen haftet. Die klassischen Werte von ϕ_0 werden nämlich in dem Fall unter dem Einfluss von Quantenfluktuationen verschoben. Eine Funktion mit diesen Eigenschaften stellt man unter dem Begriff des *effektiven Potentials* dar.

Im Folgenden sei $\phi(x)$ ein einkomponentiges skalares Quantenfeld¹⁰. Die Vakuumenergie $E[J]$ als ein Funktional der äußeren Quelle $J(x)$ definieren wir anhand des erzeugenden Funktionals¹¹

$$Z[J] = e^{-iE[J]} = \int \mathcal{D}\phi \exp \left[i \int d^d x (\mathcal{L}[\phi] + J(x)\phi(x)) \right]. \quad (2.5)$$

⁹Für den Beweis des Goldstone-Theorems siehe [20].

¹⁰Den Vorgang kann man auf mehrkomponentige Skalarfelder, Spinor- bzw. Vektor-Felder erweitern [21].

¹¹Die Wahl der Integrationsgrenzen sowie die Definition des Integrationsmaßes $\mathcal{D}\phi$ in der Pfadintegraldarstellung der QFT werden wir im Kapitel 3 dieser Arbeit besprechen. Hier rechnet man in der Minkowski-Raumzeit.

Damit berechnen wir die funktionale Ableitung von $E[J]$ nach $J(x)$,

$$\frac{\delta}{\delta J(x)} E[J] = i \frac{\delta}{\delta J(x)} \ln Z = - \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x) e^{i \int (\mathcal{L} + J\phi)}}{\int \mathcal{D}\phi e^{i \int (\mathcal{L} + J\phi)}} \equiv \Phi(x).$$

Dabei bezeichnet $\Phi(x)$ laut dem Pfadintegralformalismus der Quantenfeldtheorie der Vakuumerwartungswert des Feldes $\phi(x)$ in Anwesenheit der äußeren Quelle J . Man achte darauf, dass $\Phi(x)$ als die zu $J(x)$ konjugierte thermodynamische Variable behandelt werden kann.

Nun definieren wir die *effektive Wirkung*

$$\Gamma[\Phi] = -E[J] - \int d^d y J(y) \Phi(y)$$

als die Legendre-Transformation von $E[J]$. Daraus folgt, dass

$$\frac{\delta}{\delta \Phi(x)} \Gamma[\Phi] = -J(x). \quad (2.6)$$

Schaltet man die äußere Quelle $J(x)$ in (2.6) ab, liefern die Nullstellen von

$$\frac{\delta}{\delta \Phi(x)} \Gamma[\Phi] = 0 \quad (2.7)$$

die möglichen Vakuumerwartungswerte Φ der Theorie. Solange diese Grundzustände Poincaré-invariant sind, hat (2.7) nur von x unabhängige konstante Werte als Lösung. Die effektive Wirkung ist eine extensive Größe. Die intensive Variable in dem Zusammenhang definieren wir als das *effektive Potential*

$$U_{\text{eff}}(\Phi) = -\frac{1}{V} \Gamma[\Phi],$$

wobei V das Raumzeitvolumen bezeichnet, über das in (2.5) integriert wird. Die Gleichung (2.7) reduziert sich dann auf

$$\frac{\partial}{\partial \Phi} U_{\text{eff}}(\Phi) = 0.$$

Das absolute Minimum von U_{eff} ist der Grundzustand der Theorie. Im Falle einer spontanen Symmetriebrechung wird das System, wie schon erwähnt, mehrere Minima mit identischem Vakuumerwartungswert haben [21]. Das letzte Ergebnis zeigt am schönsten die Analogie zwischen der Behandlung eines Phasenübergangs zweiter Ordnung in der QFT und der Landau-Theorie.

3 | Gitterformulierung der Quantenfeldtheorie

3.1. Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik

Infolge einer Bemerkung von P. Dirac und im Anschluss an seine Dissertation hat R. Feynman den Pfadintegralformalismus der Quantenmechanik im Jahre 1948 veröffentlicht [22]. Hier bringen wir eine kurze Übersicht über die wichtigsten Aspekte dieser Theorie.

Im Folgenden betrachten wir ein Schrödinger-System mit einem Freiheitsgrad¹. Ein spinloses Teilchen der Masse m bewegt sich in dem Potential $V(q)$. Die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems vom Zeitpunkt t_i zum Zeitpunkt t_f in der Ortsraumdarstellung kann man durch

$$\psi(t_f, q_f) = \int dq_i G(t_f, q_f; t_i, q_i) \psi(t_i, q_i)$$

ausdrücken, wobei $\psi(t, q)$ die Wellenfunktion bezeichnet und $t_i < t_f$. Die Greensche Funktion

$$G(t_f, q_f; t_i, q_i) \equiv \langle q_f | e^{-iH(t_f-t_i)} | q_i \rangle \quad (3.1)$$

ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass das System von (t_i, q_i) nach (t_f, q_f) propagiert. Dabei ist $H = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$ der Hamilton-Operator. Die Vektoren $|q_i\rangle$ und $|q_f\rangle$ sind Eigenzustände des Ortsoperators \hat{q} [16].

Feynmans Formulierung zufolge ist der Propagator in (3.1) proportional zu der Summe

$$\sum_{\text{Pfade}} e^{iS_M[q, \dot{q}]/\hbar} \quad (3.2)$$

über *alle* Pfade im Konfigurationsraum des Systems, die die festen Punkte q_i und q_f miteinander verbinden. Dabei ist $S_M[q(t), \dot{q}(t)]$ die Wirkung jeder klassischen Trajektorie in der Minkowski-Raumzeit [22].

Um die Summation in (3.2) präziser zu definieren, führt man ein *Zeitgitter* ein. Dazu teilt man das Zeitintervall $[t_i, t_f]$ in n äquidistante kleinere Teilintervalle mit dem Gitterabstand $a \equiv (t_f - t_i)/n$. Dies gibt die Möglichkeit, die Summe durch ein mehrdimensionales Integral zu ersetzen

$$G(t_f, q_f; t_i, q_i) = C \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{D}q e^{iS_M[q_j, \dot{q}_j]/\hbar}, \quad \mathcal{D}q \equiv \prod_{j=1}^{n-1} dq_j,$$

wobei $t_j \equiv t_i + ja$ und $q_j \equiv q(t_j)$ [23]. Die Proportionalitätskonstante C wird durch die Bedingung

$$\lim_{t_f \rightarrow t_i} G(t_f, q_f; t_i, q_i) = \delta(q_f - q_i)$$

eindeutig bestimmt [16]. In der Exponentialfunktion hat man die Wirkung in folgender Form

$$S_M[q_j, \dot{q}_j] = \sum_{j=0}^{n-1} a \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 - V(q_j) \right].$$

¹Die Verallgemeinerung auf N Freiheitsgrade ist analog möglich.

Dabei wurde in dem ersten Term die Definition der Vorwärtsableitung angewendet [16, 24]. Der Kontinuumsliches wird durch $n \rightarrow \infty$ und $a \rightarrow 0$ erreicht, während $t_f - t_i$ fest gehalten wird [23].

Gleichung (3.2) ist eine Summe von schnell oszillierenden Funktionen. Durch die *Wick-Rotation* $t \rightarrow -i\tau$ kann man die Zeit auf der imaginären Zeitachse fortsetzen. Somit wird jeder Pfad mit einem exponentiell gedämpften Faktor gewichtet. Man erhält somit das zu Zwecken der numerischen Rechnungen wohldefinierte Pfadintegral

$$G(\tau_f, q_f; \tau_i, q_i) = \langle q_f | e^{-H(\tau_f - \tau_i)} | q_i \rangle = C \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{D}q e^{-S_E[q_j, \dot{q}_j]/\hbar},$$

mit

$$S_E[q_j, \dot{q}_j] = \sum_{j=0}^{n-1} a \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 + V(q_j) \right].$$

Da die Minkowski-Metrik nach der Wick-Rotation zur euklidischen Metrik wird, nennt man $S_E[q_j, \dot{q}_j]$ die euklidische Wirkung (vgl. das Plus- bzw. Minuszeichen zwischen beiden Termen in S_E und S_M) [23].

Das letzte Ergebnis enthält eine bemerkenswerte Verbindung zwischen der Quantenmechanik und der statistischen Physik. Der Schlüssel dazu ist die Übereinstimmung der Euklidischen Wirkung S_E mit der Form eines klassischen Hamiltonians H . Aus der statistischen Physik ist bekannt, dass man die kanonische Zustandssumme $Z(\beta)$ eines statistischen Systems bei inverser Temperatur $\beta = 1/k_B T$ anhand

$$Z(\beta) = \text{Spur } e^{-\beta H}$$

bestimmen kann. Eine Umdefinition von $\beta \equiv (\tau_f - \tau_i)/\hbar$ zeigt uns den manifesten Anknüpfungspunkt beider Theorien:

$$Z(\beta) = \int dq_i dq_f \delta(q_f - q_i) G(\tau_f, q_f; \tau_i, q_i). \quad (3.3)$$

In (3.3) integriert man über *alle* periodischen Pfade mit der Periode $\beta\hbar$. Für jeden Pfad ist der Anfangs- und Endpunkt identisch [23].

In Analogie zur statistischen Mechanik berechnet man die thermischen Korrelationsfunktionen

$$\langle \hat{q}(\tau_1) \hat{q}(\tau_2) \dots \hat{q}(\tau_n) \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \text{Spur} \left(e^{-\beta H} \hat{q}(\tau_1) \hat{q}(\tau_2) \dots \hat{q}(\tau_n) \right) \quad (3.4)$$

am besten durch die Verwendung der Zustandssumme

$$Z(\beta, J) = C \oint_{q(0)=q(\beta)} \mathcal{D}q e^{-S_E[q_j, \dot{q}_j] + \int d\tau J(\tau) q(\tau)}, \quad (3.5)$$

in Anwesenheit einer äußeren Quelle $J(\tau)$. Die Integration in (3.5) läuft über alle $\beta\hbar$ -periodischen Pfade. Mehrfache Ableitung der obigen Erzeuger-Funktion liefert uns die zeitgeordneten *n-Punkt-Funktionen* in der Quantentheorie

$$\langle T \hat{q}(\tau_1) \hat{q}(\tau_2) \dots \hat{q}(\tau_n) \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta, 0)} \frac{\delta}{\delta J(\tau_1)} \dots \frac{\delta}{\delta J(\tau_n)} Z(\beta, J) \Big|_{J=0}. \quad (3.6)$$

Die Ableitungen von $\ln Z(\beta, J)$ produzieren in der selben Art und Weise die *verbundenen n-Punkt-Funktionen*. Im Limes $\beta \rightarrow \infty$ integrieren wir in (3.5) über alle Pfade und erhalten in (3.6) die Vakuumerwartungswerte [16]. In (3.5) sowie im weiteren Verlauf dieser Arbeit verwenden wir die natürlichen Einheiten $\hbar = c = 1$.

Nach den obigen Betrachtungen stellt man fest, dass ein in der imaginären Zeit formuliertes quantenmechanisches Problem eigentlich gleichbedeutend ist mit einem Problem auf einem realen Kristallgitter in der statistischen Physik [23]. Demnach ist die Benutzung der uns von der statistischen Mechanik bekannten Begriffe und Techniken in der Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik zugelassen. Genau dieses Resultat wird uns in den folgenden Abschnitten bei den Überlegungen über die Quantenfelder behilflich sein.

3.2. Quantenfelder auf dem Gitter

In seinem Originalpapier über den Pfadintegralformalismus [22] hat Feynman zwei „Gründe“ für seine neue Formulierung der Quantenmechanik gebracht. Erstens war er der Meinung, dass *es eine Freude ist, alte Dinge von einer neuen Ansicht wiederzuerkennen*. Viel wichtiger war aber vielleicht die *Hoffnung, dass die neue Ansicht eine Idee zur Modifizierung von gegenwärtigen Theorien inspirieren würde*.

Der zweite Punkt scheint im Falle der Quantenfeldtheorien vollständig gerechtfertigt zu sein. Im Gegensatz zur Quantenmechanik, wo es mehrere effiziente Methoden zur Bestimmung der Streuungsamplituden bzw. Eigenvektoren und Energien von gebundenen Zuständen gibt, kann man in einer kanonisch quantisierten Feldtheorie die n -Punkt-Funktionen nur mit Hilfe der perturbativen Methoden berechnen. Der Pfadintegralformalismus erlaubt eine nicht-perturbative Behandlung dieser Probleme in der QFT [24].

Der Überschaubarkeit halber betrachten wir in diesem Abschnitt ein skalares Quantenfeld mit Euklidischen Feldoperatoren $\phi(x) \equiv \phi(\tau, \mathbf{x})$, die die kanonischen Kommutatorrelationen erfüllen, und der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi) = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + V(\phi) \quad (3.7)$$

in d Dimensionen.

Eine Übertragung unserer Ergebnisse, besonders (3.4), im Sinne von $\hat{q}(\tau) \rightarrow \phi(x)$ ergibt, dass

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \oint \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) e^{-S_E[\phi]}, \quad (3.8)$$

wobei

$$Z(\beta) = \oint \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]} \quad \text{und} \quad S_E[\phi] = \int d^d x \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi).$$

In (3.8) integrieren wir wiederum über alle β -periodischen Felder, $\phi(\tau + \beta, \mathbf{x}) = \phi(\tau, \mathbf{x})$. Auf der linken Seite der Gleichung bezeichnen $\phi(x_i)$ die Feldoperatoren im Raumzeitpunkt x_i , während man auf der rechten Seite mit den klassischen Feldvariablen arbeitet. Diese Konvention werden wir im weiteren Verlauf dieser Arbeit beibehalten. Eine explizite Unterscheidung in der Notation scheint nicht unbedingt notwendig zu sein und würde die Lesbarkeit der Beziehungen schaden.

Für $\beta \rightarrow \infty$ integriert man über *alle* Felder und berechnet dabei die Vakuumerwartungswerte von zeitgeordneten Produkten der Feldoperatoren

$$\langle \Omega | T \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) | \Omega \rangle.$$

Den Vakuumzustand der Theorie bezeichnet man mit $|\Omega\rangle$. Diese Korrelationsfunktionen beinhalten alle Informationen über das Quantensystem [24].

Analog zum letzten Abschnitt kann man auch hier die n -Punkt-Funktionen (3.8) als Ableitungen des erzeugenden Funktionals

$$Z[\beta, J] = \oint \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi] + \int d^d x J(x) \phi(x)} \quad (3.9)$$

darstellen

$$\langle T \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) \rangle_\beta = \frac{1}{Z[\beta, 0]} \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta J(x_n)} Z(\beta, J) \Big|_{J=0}.$$

In (3.9) haben wir zu der Lagrange-Dichte (3.7) einen Term mit einer äußeren Quelle $J(x)$ hinzugefügt [16, 21].

Zur Regularisierung der Theorie führen wir an dieser Stelle ein d -dimensionales hyperkubisches *Raumzeitgitter* der Kantenlänge $L_\mu = N_\mu a$ mit dem Gitterabstand a ein. Das Gitter hat ein *endliches* Volumen $V = N^d$ [25]. Die Felder werden dann nur auf den Punkten $x_\mu \equiv n_\mu a$

betrachtet, wobei $n_\mu \in \mathbb{Z}$. Durch die Diskretisierung ist die formale Integration in (3.8) wohldefiniert. Dies erklären wir am Beispiel der freien Theorie mit

$$V(\phi) = \frac{1}{2} m^2 \phi^2.$$

Dazu definieren wir zunächst die dimensionslosen Größen

$$\hat{\phi}_n \equiv a\phi(n^\mu a) \quad \text{und} \quad \hat{m} \equiv am.$$

und drücken die Euklidische Wirkung durch die Bilinearform

$$S_E = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \hat{\phi}_n K_{nm} \hat{\phi}_m$$

aus, mit der positivdefiniten symmetrischen Matrix

$$K_{nm} \equiv - \sum_{\nu>0} (\delta_{n+\hat{\nu},m} + \delta_{n-\hat{\nu},m} - 2\delta_{n,m}) + \hat{m}^2 \delta_{nm}. \quad (3.10)$$

Dabei bezeichnet $\hat{\nu}$ den Einheitsvektor in ν -Richtung. Das erzeugende Funktional in (3.9) kann man als mehrdimensionales Gauß-Integral über c-Zahlen auswerten

$$Z[\beta, J] = \oint \prod_l d\phi_l e^{-S_E[\hat{\phi}] + \sum_n \hat{J}_n \hat{\phi}_n} = \frac{(2\pi)^{\frac{V}{2}}}{\sqrt{\det K}} e^{\frac{1}{2} \sum_{n,m} \hat{J}_n K_{nm}^{-1} \hat{J}_m}. \quad (3.11)$$

Hier ist K^{-1} die Inverse der in (3.10) angegebenen Matrix K . Die 2-Punkt-Funktion für das bosonische Feld ist dann

$$\langle \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m \rangle = K_{nm}^{-1} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d \hat{p}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\hat{p}(n-m)}}{4 \sum_\nu \sin^2 \frac{\hat{p}_\nu}{2} + \hat{m}^2}. \quad (3.12)$$

Die Integration läuft über die Impulse in der *Brillouin-Zone* $[-\pi, \pi]$ [24, 26].

Für Übergang ins Kontinuum führt man den Gitterabstand a in (3.12) ein, indem man die dimensionslosen Variablen $\hat{\phi}_n$, n^μ und \hat{m} durch $a\phi(n^\mu a)$, $\frac{1}{a}x^\mu$ bzw. am ersetzt,

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{e^{ip(x-y)}}{\sum_\nu \frac{2^2}{a^2} \sin^2 \frac{p_\nu a}{2} + m^2}. \quad (3.13)$$

Im Limes $a \rightarrow 0$, während wir m , $\phi(x)$ und x festhalten, erhalten wir den uns schon bekannten Feynman-Propagator im Kontinuum,

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{e^{ip(x-y)}}{p^2 + m^2}.$$

Es ist zu beachten, dass die obige „naive“ Vorgehensweise nicht immer funktioniert. Die Wahl der festzuhaltenden Parameter spielt bei einer solchen Prozedur eine große Rolle. Im Falle einer wechselwirkenden Theorie, zum Beispiel, ist in dem Massenparameter m kein physikalischer Sinn enthalten und darf nicht beim Übergang ins Kontinuum festgehalten werden [24].

Des Weiteren muss man auch Fälle in Betracht ziehen, bei denen der Gitterabstand nicht explizit bekannt ist und man lediglich auf die numerischen Rechnungen angewiesen ist. Hier betrachtet man die Korrelationslänge ξ in Einheiten des Gitterabstandes. Das Kontinuum wird dann für $\xi \rightarrow \infty$ im Phasenübergang erreicht [24].

Schließlich wollen wir aber betonen, dass man die Gittertheorie nicht als eine Näherung des Kontinuums betrachten soll. Sie ist im Kontinuum nicht definiert. Ein Übergang ins Kontinuum wird erst mithilfe der Renormierung durch die Anpassung der „nackten“ Parameter der Theorie möglich [26].

3.3. Der Fall der Fermionen

Die Untersuchung der bosonischen Felder auf dem Gitter hat eine sehr „intuitive“ Vorgehensweise. Die fermionischen Felder weisen dagegen selbst auf dem Niveau des freien Dirac-Feldes einige Probleme auf, die erst mit Hilfe besonderer Lösungsansätze behoben werden können. Um diese zu verdeutlichen, beginnen wir mit dem Dirac-Langrange-Dichte im euklidischen Raum

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = \bar{\psi}(x)(\not{\partial} + m)\psi(x), \quad \not{\partial} \equiv \gamma^\mu \partial_\mu,$$

wobei die Diracschen γ -Matrizen die Antikommutatorrelationen $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\delta^{\mu\nu} \mathbb{1}$ erfüllen². Das zeitgeordnete Produkt dieser Spinorfelder kann man durch die Auswertung des Pfadintegrals

$$\langle \bar{\psi}_\alpha(x) \dots \psi_\beta(x) \dots \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \bar{\psi}_\alpha(x) \dots \psi_\beta(x) \dots e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi]} \quad (3.14)$$

berechnen, wobei

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi]} \quad \text{und} \quad S_E[\bar{\psi}, \psi] = \int \mathcal{d}^d x \mathcal{L}_{\text{Dirac}}.$$

Die Indizes α und β bezeichnen die Spinorkomponenten. In (3.14) integrieren wir über alle Felder und Spinorkomponenten. Das Integrationsmaß ist demzufolge definiert als

$$\mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \equiv \prod_{x, \alpha} d\bar{\psi}_\alpha(x) d\psi_\alpha(x).$$

Auf dem Gitter rechnen wir auch im Falle der fermionischen Felder mit dimensionslosen Variablen

$$\hat{\psi}_\alpha(n) \equiv a^{\frac{3}{2}} \psi_\alpha(x), \quad \bar{\hat{\psi}}_\alpha(n) \equiv a^{\frac{3}{2}} \bar{\psi}_\alpha(x) \quad \text{und} \quad \hat{m} \equiv am.$$

Bevor wir mit unserer Rechnung weitergehen, muss man darauf achten, dass die Pfadintegraldarstellung der kommutierenden bosonischen Felder in der Quantenfeldtheorie durch die Anwendung der c-Zahlen realisiert wird. Um die Fermi-Dirac-Statistik zu erfüllen, müssen die fermionischen Feldoperatoren miteinander antikommutieren. Diese werden deshalb im klassischen Limes durch Graßmann-Variablen dargestellt³ [16]. Das erzeugende Funktional hängt somit von graßmannwertigen Quellen $\bar{\eta}$ und η ab

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \int \mathcal{D}\bar{\hat{\psi}} \mathcal{D}\hat{\psi} e^{-S_E[\bar{\hat{\psi}}, \hat{\psi}] + \sum_{n, \alpha} [\bar{\hat{\psi}}_\alpha(n) \eta_\alpha(n) + \bar{\eta}_\alpha(n) \hat{\psi}_\alpha(n)]} \quad (3.15)$$

mit

$$S_E[\bar{\hat{\psi}}, \hat{\psi}] = \sum_{n, m, \alpha, \beta} \bar{\hat{\psi}}_\alpha(n) K_{\alpha\beta}(n, m) \hat{\psi}_\beta(m),$$

$$K_{\alpha\beta}(n, m) \equiv \sum_\nu \frac{1}{2} (\gamma^\mu)_{\alpha\beta} [\delta_{n+\hat{\nu}, m} - \delta_{n-\hat{\nu}, m}] + \hat{m} \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}.$$

Eine Auswertung von (3.15), die nämlich eine Integration über graßmannwertigen Variablen beinhaltet, ergibt, dass

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \det K e^{\sum_{n, \alpha} \bar{\eta}_\alpha(n) K_{\alpha\beta}^{-1}(n, m) \eta_\beta(m)}.$$

Man beachte, dass das erzeugende Funktional (3.11) im Gegensatz zum bosonischen Fall proportional zu $\det K$ ist [24].

²Eine ausführliche Diskussion der Diracschen γ -Matrizen findet man im Anhang A.

³Im Anhang B werden die wichtigsten Eigenschaften der Graßmann-Algebra dargestellt.

Um auf den zweiten Unterschied zwischen den bosonischen und fermionischen Gittertheorien aufmerksam zu machen, betrachten wir die fermionische 2-Punkt-Funktion

$$\langle \hat{\bar{\psi}}_\alpha(n) \hat{\psi}_\beta(m) \rangle = K_{\alpha\beta}^{-1}(n, m).$$

Durch die Einführung des Gitterabstandes a und unter Verwendung der im bosonischen Fall bereits verwendeten „naiven“ Vorschrift kann man zeigen, dass

$$\langle \bar{\psi}_\alpha(x) \psi_\beta(y) \rangle = \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{(-i \sum_\nu \gamma^\nu p_\nu + m)_{\alpha\beta}}{\sum_\nu \frac{1}{a^2} \sin^2 p_\nu a + m^2} e^{ip(x-y)}. \quad (3.16)$$

Der für unsere Diskussion wichtige Unterschied liegt im ersten Term im Nenner von (3.13) bzw. (3.16)

$$\tilde{p}(p_\nu) \equiv \begin{cases} \frac{2}{a} \sin \frac{p_\nu a}{2} & \text{für Bosonen} \\ \frac{1}{a} \sin p_\nu a & \text{für Fermionen} \end{cases}.$$

Das Argument der Sinus-Funktion wird nämlich für die fermionische Gittertheorie verdoppelt. Dies ist eine direkte Folge der Definition von Ableitungen auf dem Gitter als Finite-Differenzen und der Tatsache, dass in der Dirac-Gleichung eine Ableitung erster Ordnung auftaucht, während man in der Klein-Gordon-Gleichung es mit einer Ableitung zweiter Ordnung zu tun hat [24].

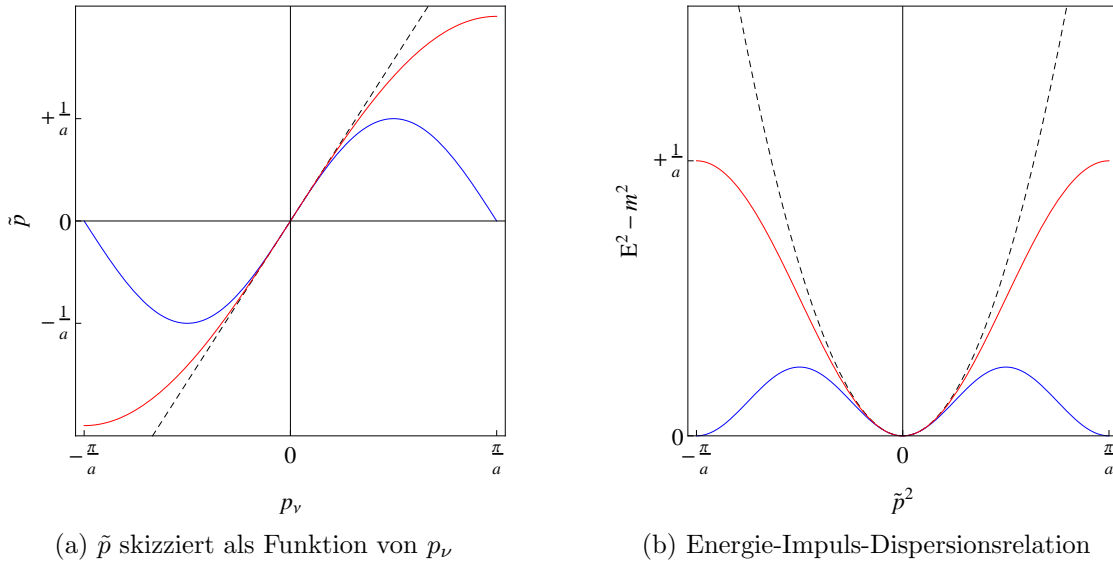


Abbildung 3.1.: (a) Während \tilde{p} im bosonischen Fall (rot) eine gute Näherung des Kontinuumslimes (schwarz gestrichelt) für kleine p_ν ist, verschwindet \tilde{p} für Fermionen (blau) an den Rändern der Brillouin-Zone. (b) Jeder Energie-Eigenwert E hat im Kontinuum (schwarz gestrichelt) und für bosonische Gittertheorien (rot) einen Eigenzustand für $\tilde{p} < 0$ und einen Eigenzustand für $\tilde{p} > 0$. Die Anzahl der Eigenzustände wird für Fermionen (blau) verdoppelt.

Für das skalare Feld ist die Integration in (3.13) im Intervall $[-\pi/a, \pi/a]$ hauptsächlich von den Impulsen dominiert, deren Wert viel kleiner als der inverse Gitterabstand ist. Daher kann man beim Übergang ins Kontinuum \tilde{p} durch p ersetzen. Wie man jedoch in Abbildung 3.1a sieht, verschwindet \tilde{p} für fermionische Felder auch an den Rändern der Brillouin-Zone. Dieses Verhalten verursacht eine sogenannte *Verdoppelung* der Fermionen in jeder Dimension auf dem Gitter. In d Dimensionen hat man dann 2^d fermionische Anregungen, obwohl davon $2^d - 1$ reine Gitterartefakte sind [24].

Diesen Sachverhalt sieht man viel besser, indem man die Energie-Impuls-Dispersionsrelationen dieser beiden Felder in (1+1) Dimensionen studiert. Im Kontinuum hat man nach der speziellen Relativitätstheorie $E^2 = p^2 + m^2$. Im Falle der fermionischen Felder wird diese Beziehung durch

$$E^2 = \frac{1}{a^2} \sin^2 p_\nu a + m^2$$

ersetzt, wobei $-\pi/a \leq p_\nu \leq \pi/a$. Wie man in Abbildung 3.1b sieht, hat jeder Energie-Eigenwert E im Gegensatz zum Kontinuum zwei verschiedene Zustände für $\tilde{p} < 0$ bzw. zwei Eigenzustände für $\tilde{p} > 0$. Das ist ein Zeichen dafür, dass die Fermionen doppelt gezählt werden. Für Bosonen taucht dieses Problem nicht auf [27].

Als Lösung gibt es verschiedene Ansätze in der Literatur. Eine der am häufigsten verwendeten Formulierungen der Fermionen auf dem Gitter stammt von einem Artikel von K. Wilson [28]. Er schlug vor, die verschwindenden Werte von \tilde{p} an den Rändern der Brillouin-Zone durch die Einführung eines impulsabhängigen Terms zu dem freien Lagrangian um einen zu $1/a$ proportionalen Betrag anzuheben [24].

Ein zweiter Ansatz haben L. Susskind und J. Kogut 1975 veröffentlicht [29], in dem sie die Brillouin-Zone durch eine Vergrößerung des effektiven Gitterabstandes zu verringern versuchten. Dabei verteilt man die fermionischen Freiheitsgrade in einer solchen Art und Weise auf die Gitterpunkte, dass der effektive Gitterabstand gleich $2a$ wird [24].

Die genannten Methoden haben jedoch den Nachteil, dass sie die chirale Symmetrie entweder explizit oder zum Teil brechen [16]. Diese Tatsache macht sie zum Zwecke unserer Untersuchung nicht geeignet. In der vorliegenden Arbeit werden wir ausschließlich die so genannten SLAC-Fermionen verwenden. Eine kurze Einführung dieser Definition der Ableitungsoperator findet man im nächsten Abschnitt.

3.4. SLAC-Ableitung

Im Jahre 1976 haben S. Drell *et al.* eine weitere Definition zur Berechnung der Ableitungen auf dem Gitter vorgeschlagen, die die richtige Form der Energie-Impuls-Dispersionsrelation unterhalb des UV-Cutoffs wiedergibt und gleichzeitig die Verdoppelung der Fermionen verhindert [25, 27].

Zur Definition des Gradienten für ein eindimensionales Gitter mit N Punkten und dem Gitterabstand a betrachtet man die Fourier-Darstellung der Funktion $f_n \equiv f(na)$

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=-N'}^{N'} e^{ip_k n} \tilde{f}(p_k), \quad N' \equiv \frac{1}{2}(N-1), \quad p_k \equiv \frac{2\pi}{N}k,$$

die den Funktionswert in dem Punkt n zurückgibt. Der Ableitungsoperator ist dann

$$\nabla f_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=-N'}^{N'} ip_k e^{ip_k n} \tilde{f}(p_k) = \frac{1}{N} \sum_{m=-N'}^{N'} \left(\sum_{k=-N'}^{N'} ip_k e^{ip_k(n-m)} \right). \quad (3.17)$$

In dem letzten Schritt verwendet man die Fourier-Rücktransformation

$$\tilde{f}(p_k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=-N'}^{N'} e^{-ip_k n} f_n.$$

Die symmetrische Summation sichert einen reellen Differenz-Operator [30]. Anhand der Gleichung (3.17) erkennt man die langreichweitige Korrelation zwischen den Gitterpunkten bei der SLAC-Definition des Ableitungsoperators. Bei gewöhnlichen Finite-Differenzen setzt man dagegen oft eine Nächste-Nachbar-Wechselwirkung voraus [25].

Diese Definition können wir problemlos für eine Feldtheorie auf dem Gitter erweitern [30]. Wir nehmen an, dass die Funktionen $x_n \mapsto \psi_n \in \mathbb{C}$ mit dem Skalarprodukt

$$(\phi, \psi) = \sum_{n=1}^N \bar{\phi}_n \psi_n$$

einen Hilbertraum definieren. Für normierte ψ_n können wir $|\psi_n|^2$ als die Wahrscheinlichkeit dafür interpretieren, das durch die Wellenfunktion ψ beschriebene Teilchen auf dem Gitterpunkt n zu finden.

Der Erwartungswert einer nur vom Ortsoperator \hat{n} abhängigen Funktion g entspricht

$$\langle g(\hat{n}) \rangle_\psi = \sum_n g(n) |\psi_n|.$$

Die oben eingeführte Fourier-Transformation erlaubt uns, eine ähnliche Form für Funktionen $g(\hat{p})$ aufzuschreiben, die nur vom Impulsoperator \hat{p} abhängen

$$\langle g(\hat{p}) \rangle_\psi = \sum_{k=-N'}^{N'} g(p_k) |\tilde{\psi}(p_k)|^2 = \sum_{n,m=-N'}^{N'} \bar{\psi}_n g(\hat{p})_{nm} \psi_m,$$

wobei

$$g(\hat{p})_{nm} = \frac{1}{N} \sum_{k=-N'}^{N'} e^{ip_k(n-m)} g(p_k)$$

und $\tilde{\psi}(p_k)$ die Fouriertransformierte der Funktion ψ_n bezeichnet. Für periodische Felder muss die Anzahl der Gitterpunkte N eine ungerade Zahl sein. Ein antiperiodisches Feld erhält man für gerades N [16].

Der reelle, antisymmetrische und nicht-lokale SLAC-Operator $\partial_{\text{SLAC}} = i\hat{p}$ ist im Ortsraum eine Toeplitz-Matrix

$$(\partial_{\text{SLAC}})_{nm} = (-)^{n-m} \frac{\pi/N}{\sin(\pi(n-m)/N)} \quad \text{für } n \neq m.$$

Die Diagonalelemente verschwinden, $(\partial_{\text{SLAC}})_{nn} = 0$ [30].

4 | Monte-Carlo-Simulationen von Gittertheorien mit Fermionen

4.1. Monte-Carlo-Methoden: Ein Abriss

Zur Berechnung der n -Punkt-Funktionen in (3.8) bzw. (3.14) in der Quantenfeldtheorie ist man auf die numerische Auswertung eines mehrdimensionalen Integrals angewiesen. Wir wissen jedoch, dass die „traditionelle“ Integrationsmethoden mit steigender Dimension des Phasenraums immer langsamer konvergieren, und zwar, in d Dimensionen gibt es einen numerischen Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-\kappa/d})$, wobei N die Anzahl der Stützstellen in einer Dimension und κ eine Konstante ist, die von der Integrationsmethode (Rechteck-, Trapez-, Simpson-Regel, etc.) abhängt. Aus diesem Grunde sind diese Integrationsmethoden für solche Rechnungen ineffizient. Ein Lösungsansatz für dieses Problem sind die sogenannten *Monte-Carlo-Methoden*, bei denen der numerische Fehler von der Phasenraumdimension unabhängig ist [31].

Bei einer Monte-Carlo-Integration in der Quantenfeldtheorie erzeugt man eine endliche Anzahl an Feldkonfigurationen mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit, berechnet die Erwartungswerte für jede Konfiguration und mittelt die Ergebnisse. Zur Erzeugung dieser Konfigurationen bei physikalischen Untersuchungen werden in der Regel *Markovprozesse* genutzt, da es normalerweise viel einfacher und rechnerisch günstiger ist, eine existierende Konfiguration leicht zu modifizieren als für jeden Simulationsschritt eine neue Konfiguration zu erzeugen [31].

Im Folgenden betrachten wir ein skalares Quantenfeld $\phi(x)$. Der Erwartungswert eines Operators $A[\phi]$ wird nach (3.8) durch

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi A[\phi] e^{-S_E[\phi]}$$

berechnet [32]. Des Weiteren ist $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ eine endliche Menge, wobei ϕ_i die Feldkonfiguration im i -ten Simulationsschritt bezeichnet. Wir nehmen an, dass der Übergang von ϕ_i zu ϕ_j durch einen stochastischen Prozess mit einer Übergangswahrscheinlichkeit $P_M(\phi_i \rightarrow \phi_j)$ stattfindet. Generiert man zu der Simulationszeit τ_i die Konfiguration ϕ_{τ_i} mit der Bedingung, dass die Übergangswahrscheinlichkeit bei einem solchen Übergang *nur* von der unmittelbar vorangehenden Konfiguration abhängt, bezeichnet man diese Reihe der Konfigurationen als eine *Markovkette*. Im Falle einer irreduziblen, aperiodischen Markovkette mit positiven Zuständen (Konfigurationen) kann man beweisen, dass das Zeitmittel

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A[\phi_{\tau_i}] \quad (4.1)$$

sich dem Ensemble-Mittel

$$\langle A \rangle = \sum_i P_{\text{eq}}(\phi_i) A[\phi_i] \quad (4.2)$$

mit einem stochastischen Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(1/\sqrt{M})$ annähert, wobei $P_{\text{eq}}(\phi_i)$ die Wahrscheinlichkeit dafür ist, die Konfiguration ϕ_i im Gleichgewicht anzutreffen [24].

Die Ergodizität eines Markovprozesses ist gewährleistet, wenn das detaillierte Gleichgewicht

$$P_{\text{eq}}(\phi_i)P_{\text{M}}(\phi_i \rightarrow \phi_j) = P_{\text{eq}}(\phi_j)P_{\text{M}}(\phi_j \rightarrow \phi_i) \quad (4.3)$$

erfüllt ist. Es ist vorteilhaft, die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{\text{M}}(\phi_i \rightarrow \phi_j)$ in einer Markovkette in zwei Komponenten aufzuteilen. Zunächst definiert man $P_{\text{C}}(\phi_i \rightarrow \phi_j)$ als die Wahrscheinlichkeit dafür, eine neue Konfiguration auszuwählen. Dazu kommt die Wahrscheinlichkeit $P_{\text{A}}(\phi_i \rightarrow \phi_j)$, mit der man die ausgewählte Konfiguration akzeptiert. Eine Erweiterung des *Metropolis-Algorithmus* [33] gibt uns die Gleichung

$$P_{\text{A}}(\phi_i \rightarrow \phi_j) = \min \left\{ 1, \frac{P_{\text{eq}}(\phi_i)P_{\text{C}}(\phi_i \rightarrow \phi_j)}{P_{\text{eq}}(\phi_j)P_{\text{C}}(\phi_j \rightarrow \phi_i)} \right\},$$

mit der das detaillierte Gleichgewicht für jede beliebige Wahl von P_{C} erfüllt wird [32]. Auf diese Beziehung werden wir im folgenden Abschnitt zurückkommen. Bevor wir jedoch den Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus (HMC) diskutieren, gehen wir kurz auf ein paar wichtige Punkte bezüglich der Monte-Carlo-Simulationen ein.

Erstens muss man beachten, dass die generierte Anfangskonfiguration ϕ_1 im Prinzip kein Gleichgewichtszustand ist. In der Praxis verwendet man der Einfachheit halber entweder eine vollständig geordnete oder eine ungeordnete Startkonfiguration. Demnach muss das System in den Gleichgewichtszustand gebracht werden, bevor wir mit den „Messungen“ anfangen können. Diesen Prozess nennt man *Thermalisierung*. Die zur Thermalisierung notwendige Anzahl der Simulationsschritte nennt man Thermalisierungszeit. Sie hängt von der Größe des Gitters ab und steigt für niedrige Temperaturen. Für verschiedene Observablen ist die Thermalisierungszeit unterschiedlich groß. Von daher muss man immer sicherstellen, dass alle Observablen thermalisiert worden sind, bevor man die Erwartungswerte berechnet [31].

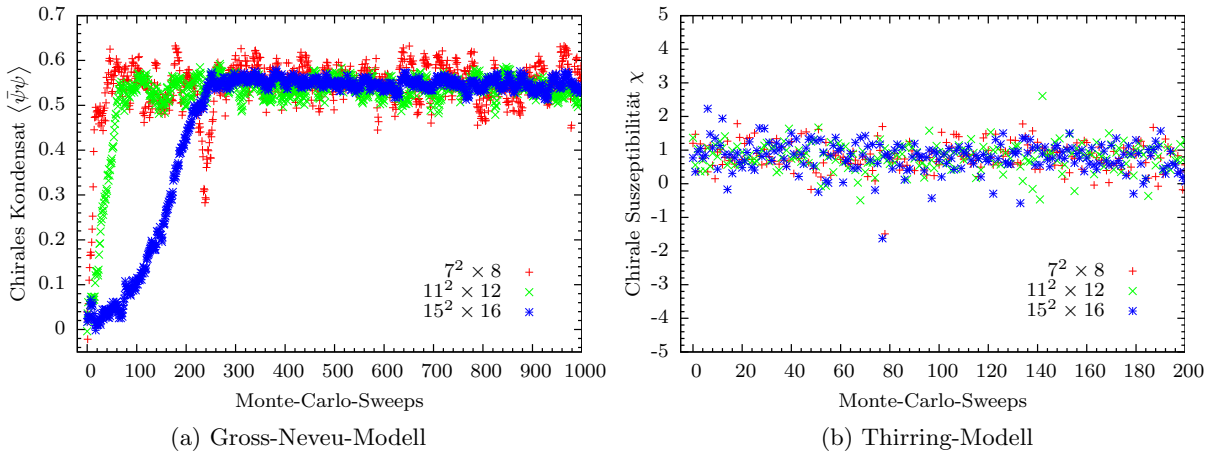


Abbildung 4.1.: (a) Die Thermalisierung des chiralen Kondensats im Gross-Neveu-Modell bei Kopplungskonstante $g^{-2} = 0.35$ und für $N_f = 1$. Hier ist der Unterschied zwischen den Thermalisierungszeiten für verschiedene Gittergrößen offensichtlich. Mit der steigenden Gittergröße braucht das System mehr Monte-Carlo-Iterationen, um den Gleichgewichtszustand zu erreichen. (b) Im Diagramm wurde die Thermalisierung der chiralen Suszeptibilität im Thirring-Modell bei Kopplungskonstante $g^{-2} = 0.25$ und für $N_f = 1$ dargestellt. Ein Vergleich beider Bilder macht klar, dass die Erwartungswerte der chiralen Suszeptibilitäten kaum eine Thermalisierung brauchen, während man in (a) auf dem $15^2 \times 16$ -Gitter erst nach etwa 300 Monte-Carlo-Sweeps mit der Messung des chiralen Kondensats beginnen kann.

Der zweite Punkt bezieht sich auf die Korrelation in einer Markovkette. Da jede Konfiguration in der Kette mit einer leichten Änderung der vorangegangenen Konfiguration erzeugt wird, sind

diese stark miteinander korreliert. Die Anzahl der Monte-Carlo-Iterationen, die man braucht, um eine von den vorherigen Konfigurationen statistisch unabhängige neue Konfiguration zu erzeugen, bezeichnet man als *Autokorrelationszeit* τ_A . Die Erwartungswerte der Observablen berechnet man in jedem Zeitintervall τ_A [31, 34].

Wie schon in Kapitel 2 erwähnt, divergiert die Korrelationslänge $\xi \sim |\varepsilon|^{-\nu}$ in der Nähe eines Phasenübergang zweiter Ordnung, wobei ν der entsprechende kritische Exponent ist. Sie ist nämlich ein Maß für die Korrelationen und Ordnung im System. In diesem Gebiet ist die Autokorrelationszeit $\tau_A \sim \xi^z$ mit $z > 1$ (typisch $z \simeq 2$). Aufgrund der Divergenz von ξ und dementsprechend sehr großer Autokorrelationszeiten werden die Simulationen in der Nähe dieser Phasenübergänge extrem langsam. Diesen Effekt nennt man *critical slowing down* [31].

Bei unseren Untersuchungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit haben wir ausschließlich den rationalen HMC-Algorithmus für fermionische Quantenfelder verwendet. In den nächsten Abschnitten werden wir diesen Algorithmus vorstellen und einige Besonderheiten der Monte-Carlo-Simulationen für Fermionen diskutieren.

4.2. Hybrid-Monte-Carlo

Bei Monte-Carlo-Simulationen von Systemen mit fermionischen Freiheitsgraden verwendet man meistens den von S. Duane *et al.* im Jahre 1987 veröffentlichten Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus¹ (HMC). Dabei wird ein virtueller Zeitparameter τ eingeführt, um die Dynamik des skalaren Feldes $\phi(\tau)$

$$\dot{\phi} = \frac{\delta H}{\delta \pi} = \pi, \quad \dot{\pi} = -\frac{\delta H}{\delta \phi} = -\frac{\delta S_E}{\delta \phi} \quad (4.4)$$

mit dem Hamiltonian

$$H[\phi, \pi] = \frac{1}{2}\pi^2 + S_E[\phi]$$

zu beschreiben. Die zu $\phi(\tau)$ konjugierten Impulse $\pi(\tau)$ werden zufällig von einer Gauß-Verteilung gezogen, wobei die Varianz gleich 1 ist und der Mittelwert verschwindet,

$$P_G \propto e^{-\frac{\pi^2}{2}}.$$

Nachdem man die Impulse $\pi(\tau)$ generiert, lässt man das System, sich für eine bestimmte Zeitperiode τ_0 gemäß der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen im (ϕ, π) -Phasenraum zu entwickeln. Dies beschreibt eine Abbildung im Phasenraum: $(\phi_i(0), \pi_i(0)) \rightarrow (\phi_i(\tau_0), \pi_i(\tau_0))$. Die Wahrscheinlichkeit, eine neue Konfiguration auszuwählen ist dann

$$P_H((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j)) = \delta[(\phi_j, \pi_j) - (\phi_i(\tau_0), \pi_i(\tau_0))].$$

Die neue Konfiguration wird mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_A((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j)) = \min \left\{ 1, e^{-\Delta H} \right\}$$

akzeptiert, wobei $\Delta H \equiv H[\phi_j, \pi_j] - H[\phi_i, \pi_i]$ ist. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist dann

$$P_M(\phi_i \rightarrow \phi_j) = \int \mathcal{D}\pi_i \mathcal{D}\pi_j P_G(\pi_i) P_H((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j)) P_A((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j)).$$

Es ist nun wichtig zu beweisen, dass der HMC-Algorithmus das detaillierte Gleichgewicht (4.3) erfüllt. Es ist zu beachten, dass die Zeitentwicklung des Systems gemäß (4.4) reversibel ist,

$$P_H((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j)) = P_H((\phi_j, -\pi_j) \rightarrow (\phi_i, -\pi_i)).$$

¹Die Darstellung des Algorithmus hier basiert zum größten Teil auf dem Artikel von Duane *et al.* [32].

Die Identität

$$e^{-H[\phi_i, \pi_i]} \min \left\{ 1, e^{-\Delta H} \right\} = \min \left\{ e^{-H[\phi_i, \pi_i]}, e^{-H[\phi_j, \pi_j]} \right\} = e^{-H[\phi_j, \pi_j]} \min \left\{ 1, e^{\Delta H} \right\}$$

und die Tatsache, dass

$$P_{\text{eq}}(\phi)P_G(\pi) \propto e^{-H[\phi, \pi]} \quad \text{und} \quad H[\phi, \pi] = H[\phi, -\pi]$$

ergeben die folgende Gleichung

$$P_{\text{eq}}(\phi_i)P_G(\pi_i)P_A((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j)) = P_{\text{eq}}(\phi_j)P_G(-\pi_j)P_A((\phi_j, -\pi_j) \rightarrow (\phi_i, -\pi_i)).$$

Durch Multiplikation mit P_H und Integration über π_i und π_j ,

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}\pi_i \mathcal{D}\pi_j P_{\text{eq}}(\phi_i)P_G(\pi_i)P_H((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j))P_A((\phi_i, \pi_i) \rightarrow (\phi_j, \pi_j)) = \\ \int \mathcal{D}\pi_i \mathcal{D}\pi_j P_{\text{eq}}(\phi_j)P_G(-\pi_j)P_H((\phi_j, -\pi_j) \rightarrow (\phi_i, -\pi_i))P_A((\phi_j, -\pi_j) \rightarrow (\phi_i, -\pi_i)), \end{aligned}$$

erhält man die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts. Auf der rechten Seite der letzten Gleichung haben wir von der Invarianz des Integrationsmaßes $\mathcal{D}\pi_i \mathcal{D}\pi_j = \mathcal{D}(-\pi_i) \mathcal{D}(-\pi_j)$ Gebrauch gemacht [32].

Die Entwicklung des Feldes ϕ wird mithilfe numerischer Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (4.4) berechnet. Dazu verwendet man einen symplektischen Integrator, der die erforderliche Reversibilitätsbedingung erfüllt. Das einfachste Beispiel ist der *Leapfrog*-Algorithmus zweiter Ordnung [35]. Bei einer Leapfrog-Integration werden zunächst die Impulse einen halben Schritt fortgesetzt

$$\pi(\Delta\tau/2) = \pi(0) - \left(\frac{\delta S[\phi(0)]}{\delta \phi} \right) \frac{\Delta\tau}{2}.$$

Danach folgen $n = \tau_0/\Delta\tau$ Schritte für ϕ

$$\phi(\tau + \Delta\tau) = \phi(\tau) + \pi(\tau + \Delta\tau/2)\Delta\tau$$

und $n - 1$ Schritte für π

$$\pi(\tau + \Delta\tau/2) = \pi(\tau - \Delta\tau/2) - \left(\frac{\delta S[\phi(\tau)]}{\delta \phi} \right) \Delta\tau.$$

Ein letzter Halbschritt für π schließt die Integration ab

$$\pi(\tau_0) = \pi(\tau_0 - \Delta\tau/2) - \left(\frac{\delta S[\phi(\tau_0)]}{\delta \phi} \right) \frac{\Delta\tau}{2}.$$

Die halben Schritte haben einen Fehler der Ordnung $(\Delta\tau)^2$. Der Fehler für die ganzen Schritte ist $(\Delta\tau)^3$. Demnach ist $\Delta H \propto (\Delta\tau)^2$. Dies garantiert eine gute Akzeptanzrate [32]. Bei den Untersuchungen in dieser Arbeit werden an mancher Stelle auch Leapfrog-Integrationen höherer Ordnung [36] verwendet, um die gewünschte Akzeptanzrate zu erreichen.

4.3. Pseudofermionen und der rHMC-Algorithmus

Wir wissen schon, dass die fermionische Felder im Pfadintegralformalismus durch Graßmann-Variablen dargestellt werden. Die antikommutierende Natur dieser Objekte lässt sich nicht ohne Weiteres implementieren. Glücklicherweise kann man dieses Problem durch die Einführung von zusätzlichen bosonischen Felder umgehen [37].

Gegeben sei die Euklidische Wirkung

$$S[\bar{\psi}, \psi, \mathcal{U}] = \int d^d x \bar{\psi}(x) D[\mathcal{U}] \psi(x) + S_0[\mathcal{U}],$$

wobei $\bar{\psi}$, ψ die fermionischen Felder, \mathcal{U} die bosonischen Felder und $S_0[\mathcal{U}]$ den rein bosonischen Anteil der Wirkung bezeichnet. Der Fermion-Operator wird durch $D[\mathcal{U}]$ ausgedrückt. Mit einer Erweiterung der in Kapitel 3 hergeleiteten Formel, berechnet man die Zustandssumme für Dirac-Fermionen anhand der Formel

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\mathcal{U} e^{-S[\bar{\psi}, \psi, \mathcal{U}]} = C \int \mathcal{D}\mathcal{U} \det(D[\mathcal{U}]) e^{-S_0[\mathcal{U}]}.$$

Im letzten Schritt haben wir die fermionischen Freiheitsgrade analytisch ausintegriert. Dabei ist C eine für unsere Diskussion irrelevante Konstante. Setzt man $M = D^\dagger D$, kann man Z in die folgende Form umschreiben

$$Z = C \int \mathcal{D}\mathcal{U} \text{sign}(D) \left| (\det M)^{\frac{1}{2}} \right| e^{-S_0[\mathcal{U}]}. \quad (4.5)$$

Man beachte, dass M gemäß der Definition ein hermitescher und positivdefiniter Operator ist. Die Monte-Carlo-Methoden funktionieren nur in dem Fall, wenn das Wahrscheinlichkeitsmaß in (4.5) positiv ist. Dies ist die Ursache des sogenannten *Vorzeichenproblems* bei Fermionen. Im weiteren Verlauf dieses Abschnittes setzen wir $\text{sign}(D) = 1$ [36].

Die exakte Berechnung der Determinante ist aber immer noch numerisch sehr aufwendig. Aus diesem Grunde führt man an dieser Stelle die komplexwertigen bosonischen Felder $\{\phi_p(x)\}_{i=1}^{N_{\text{pf}}}$ ein. F. Fucito *et al.* haben gezeigt, dass

$$(\det M)^{\frac{1}{2}} = \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi e^{-\int_x \sum_{p=1}^{N_{\text{pf}}} \phi_p^\dagger M^{-q} \phi_p}, \quad (4.6)$$

wobei $q \equiv \frac{1}{2N_{\text{pf}}}$. In (4.6) integriert man über alle Feldkonfigurationen ϕ_p^\dagger und ϕ_p . Diese bosonischen Felder wechselwirken miteinander wie Fermionen und werden daher in der Literatur *Pseudofermionen* genannt [36, 37].

Im *rationalen* HMC-Algorithmus (rHMC) [38, 39] ersetzt man M^{-q} durch eine rationale Entwicklung

$$r(x) = x^{-q} \approx \alpha_0 + \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i}{x - \beta_i}. \quad (4.7)$$

Dies ist eine relative Minimax-Näherung. Die Koeffizienten α und β werden mit Hilfe des Remez-Algorithmus berechnet. Die Genauigkeit der Entwicklung hängt von der Anzahl der Terme n , sowie der numerischen Genauigkeit von Koeffizienten α und β ab. Die Inverse der Matrix M im Nenner von (4.7) bestimmt man mithilfe des Verfahrens der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren) [35, 36].

4.4. Fehleranalyse: Jackknife-Methode

In der Einleitung dieses Kapitels haben wir erwähnt, dass die durch einen Markov-Prozess generierten Konfigurationen miteinander korreliert sind. Demzufolge braucht man spezielle Methoden zur Fehleranalyse der statistisch erzeugten Ergebnisse. Die *Jackknife*-Technik ist eine bei Monte-Carlo-Simulationen am häufigsten verwendeter Methoden.

Bevor wir diese Methode erklären, schauen wir uns die Autokorrelationszeit τ_A etwas genauer an. Gegeben seien $\{f_i\}_{i=1}^N$ als die zu den i -ten Monte-Carlo-Zeiten gemessene Werte der Observable f und $t = |i - j|$. Die Zeitdauer zwischen zwei aufeinander folgende Messungen f_i und f_{i+1}

ist immer identisch. Die Autokorrelationsfunktion dieser Observable wird wie folgt definiert

$$\hat{C}(t) = \hat{C}_{ij} = \left\langle (f_i - \langle f_i \rangle)(f_j - \langle f_j \rangle) \right\rangle = \langle f_i f_j \rangle - \langle f_i \rangle \langle f_j \rangle,$$

Asymptotisch schreibt man

$$\hat{C}(t) \sim \exp\left(\frac{-t}{\tau_A}\right) \quad \text{für} \quad t \rightarrow \infty.$$

Somit wird τ_A bestimmt, wenn die Korrelationsfunktion $\hat{C} = 1/e$ ist. Genauso gut könnte man auch die *integrierte* Autokorrelationszeit

$$\tau_{\text{int}} = 1 + 2 \sum_{t=1}^{\infty} \frac{\hat{C}(t)}{\hat{C}(0)},$$

verwenden, die die Beziehung

$$\sigma_{\text{kor}}^2(\bar{f}) = \tau_{\text{int}} N \sigma^2(\bar{f})$$

erfüllt, wobei

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum f_i \quad \text{und} \quad \sigma^2(\bar{f}) = \sum_{i=1}^N \frac{(f_i - \bar{f})^2}{N(N-1)}.$$

In der Praxis ist sie äquivalent zur Autokorrelationszeit, wird aber in der Regel einfacher berechnet. Es ist zu beachten, dass die (integrierte) Autokorrelationszeit von dem *update*-Algorithmus, sowie von der Größe des Gitters abhängt [31, 40].

Das Jackknife-Verfahren liefert uns eine bessere Fehlerabschätzung, wenn f eine nicht-lineare Funktion einer anderen Größe x ist. In dem Fall teilen wir die gemessenen Daten in der Menge $\{x_i\}_{i=1}^N$ in M Blöcke (*Bins*), deren Länge deutlich größer als die Autokorrelationszeit ist und berechnen den Mittelwert x_m^{bin} jedes m -ten Blocks. Danach berechnet man die Standardabweichung für korrelierte Daten mithilfe der Jackknife-Schätzer f_i^{J} und \bar{f}^{J}

$$\sigma^2(\bar{f}^{\text{J}}) = \frac{M-1}{M} \sum_{i=1}^M (f_i^{\text{J}} - \bar{f}^{\text{J}})^2,$$

wobei

$$\bar{f}^{\text{J}} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f_i^{\text{J}}, \quad f_i^{\text{J}} = f(x_i^{\text{J}}).$$

Zur Berechnung von x_i^{J} nimmt man den Mittelwert des i -ten Blocks weg und mittelt über alle andere Blöcke,

$$x_i^{\text{J}} = \frac{1}{M-1} \sum_{m \neq i}^M x_m^{\text{bin}}$$

Natürlich reduziert sich die Blocklänge für unkorrelierte Daten auf 1 [34, 40].

5 | Chirale Symmetriebrechung in Vier-Fermi-Modellen

5.1. Chirale Symmetrie

Nach dem *Noether-Theorem* ist mit jeder kontinuierlichen Symmetrie des physikalischen Systems eine erhaltene Größe verbunden. Übersetzt in die Sprache der skalaren Feldtheorie besagt es, dass wenn eine Transformation des Feldes $\phi(x)$,

$$\phi(x) \rightarrow \phi(x) + \delta\phi(x),$$

die Lagrange-Dichte bis auf einen Divergenz-Term unverändert lässt,

$$\mathcal{L}(x) \rightarrow \mathcal{L}(x) + \partial_\mu \mathcal{J}^\mu(x),$$

der *Noether-Strom*

$$j^\mu(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi(x))} \delta\phi(x) - \mathcal{J}^\mu(x)$$

erhalten ist, $\partial_\mu j^\mu(x) = 0$. Unter einer solchen Transformation bleiben die Bewegungsgleichungen der Theorie unverändert [41].

Dieser Formalismus gilt ohne Weiteres für den Dirac-Lagrangian in der Minkowski-Raumzeit,

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = \bar{\psi}(x)(i\rlap{\not{D}} - m)\psi(x), \quad \rlap{\not{D}} \equiv \gamma^\mu \partial_\mu. \quad (5.1)$$

Hier betrachten wir die kontinuierlichen Transformationen

$$\psi(x) \rightarrow e^{i\alpha} \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) e^{-i\alpha} \quad (5.2)$$

und

$$\psi(x) \rightarrow e^{i\alpha\gamma^5} \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) e^{i\alpha\gamma^5}, \quad (5.3)$$

wobei α ein konstanter Parameter ist und $\gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$. Die Transformation in (5.2) ist eine intrinsische Symmetrie des Dirac-Lagrangians. Dementsprechend ist der damit verbundene *Vektorstrom* $j^\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$ erhalten. Im Gegensatz dazu ist die Transformation (5.3) keine Symmetrie des Massenterms, obwohl der kinetische Term weiterhin unverändert bleibt. Aus diesem Grunde erhält man

$$\partial_\mu j^{\mu 5} = 2im\bar{\psi}\gamma^5\psi.$$

Dabei bezeichnet $j^{\mu 5}(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\gamma^5\psi(x)$ den mit der in (5.3) dargestellten sogenannten *chiralen* Transformation verbundenen *Axialvektorstrom*. Für verschwindende Fermionmasse m ist der Axialvektorstrom erhalten [21].

Die Dirac-Darstellung der Lorentz-Gruppe ist reduzibel. Dies ist offensichtlich, wenn man die im Anhang A eingeführte chirale Darstellung der γ -Matrizen verwendet. Dieser Tatsache zufolge kann man die vierkomponentigen Dirac-Spinoren $\psi(x)$ in zwei zweikomponentige Blöcke aufteilen,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix},$$

wobei ψ_L und ψ_R der *linkshändige* bzw. *rechtshändige* Weyl-Spinor genannt werden. Im Falle masseloser Fermionen erfüllen sie die entkoppelten Weyl-Gleichungen

$$i\bar{\sigma} \cdot \partial\psi_L = 0 \quad \text{und} \quad i\sigma \cdot \partial\psi_R = 0,$$

mit

$$\sigma^\mu \equiv (\mathbb{1}, \vec{\sigma}), \quad \bar{\sigma}^\mu \equiv (\mathbb{1}, -\vec{\sigma}), \quad \vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3).$$

Dabei sind σ^i die Paulischen Matrizen [21]. In der vierkomponentigen Schreibweise kann man die links- bzw. rechtshändige Komponenten des Dirac-Feldes $\psi(x)$,

$$\begin{aligned} \psi_R(x) &= P_+\psi(x), & \bar{\psi}_R(x) &= \bar{\psi}(x)P_-, \\ \psi_L(x) &= P_-\psi(x), & \bar{\psi}_L(x) &= \bar{\psi}(x)P_+, \end{aligned}$$

mithilfe der Projektionsoperatoren

$$P_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \gamma^5)$$

erzeugen. Beachtet man $\psi(x) = \psi_L(x) + \psi_R(x)$ und $\bar{\psi}(x) = \bar{\psi}_L(x) + \bar{\psi}_R(x)$, kann man die Lagrange-Dichte in (5.1) umschreiben zu

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = \bar{\psi}_L(x)(i\not{\partial} - m)\psi_L(x) + \bar{\psi}_R(x)(i\not{\partial} - m)\psi_R(x).$$

Somit entkoppelt sich die Wirkung in einen linkshändigen und einen rechtshändigen Teil. Die links- bzw. rechtshändigen Spinoren sind Eigenvektoren von γ^5 mit Eigenwerten -1 und $+1$ und transformieren getrennt voneinander. Entsprechend kann man die Ströme

$$j_L^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu P_-\psi \quad \text{und} \quad j_R^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu P_+\psi$$

einführen. Im chiralen Limes $m \rightarrow 0$ interpretiert man sie als die elektrische Stromdichte für links- bzw. rechtshändige Teilchen, die nämlich getrennt voneinander erhalten bleiben [21, 42].

Um die chirale Symmetriebrechung zu untersuchen betrachtet man meistens das chirale Kondensat

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle = \langle \Omega | \bar{\psi}(x)\psi(x) | \Omega \rangle = \langle \Omega | \bar{\psi}_R(x)\psi_L(x) + \bar{\psi}_L(x)\psi_R(x) | \Omega \rangle$$

als den Ordnungsparameter, der in der symmetrischen Phase gleich Null ist. Wird die Symmetrie des Lagrangians im Grundzustand nicht erfüllt, spricht man, wie im Kapitel 2 erwähnt, von einer spontanen Brechung der chiralen Symmetrie. In dem Fall nimmt das chirale Kondensat einen nicht-verschwindenden Wert an [24, 42].

Die spontane Brechung der chiralen Symmetrie ist ein nicht-perturbatives Phänomen. Aus diesem Grunde stellt uns die Gitterformulierung der Quantenfeldtheorie die Möglichkeit zur Verfügung, die symmetrischen Eigenschaften der chiralen Transformation in fermionischen Systemen zu untersuchen. Bis zu diesem Punkt haben wir die Diskussion über die chirale Symmetrie jedoch im Kontinuum durchgeführt, wobei wir von der Relation

$$\{D, \gamma^5\} = 0 \tag{5.4}$$

mit D als Diracoperator im chiralen Limes implizit Gebrauch gemacht haben. Die Situation in einer Gittertheorie ist etwas anders. Nach dem *Nielsen-Nynomyia-Theorem* gibt es auf dem Gitter keinen *lokalen* Diracoperator, der *kein Verdoppelungsproblem* aufweist, den *Kontinuumsliches richtig wiederherstellt* und *gleichzeitig* die antikommutatorrelation (5.4) erfüllt. Eine Lösung für dieses Problem haben P. Ginsparg und K. Wilson vorgeschlagen: wenn ein Diracoperator auf dem Gitter die Relation

$$\{D, \gamma^5\} = aD\gamma^5D$$

erfüllt, bleibt die Chiralität im Kontinuumsliches $a \rightarrow 0$ unangetastet [16, 43, 44].

Die Diskussion über die chirale Symmetriebrechung in diesem Abschnitt haben wir in der Minkowski-Raumzeit ausgeführt. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels, besonders bei den numerischen Untersuchungen, rechnen wir nach einer Wick-Rotation in der Euklidischen Raumzeit.

5.2. Einführende Notizen zu Vier-Fermi-Modellen

Nachdem wir im vorherigen Abschnitt die chirale Symmetrie diskutiert haben, möchten wir hier auf die Vier-Fermi-Theorien eingehen, die den theoretisch-physikalischen Rahmen unserer Untersuchung bestimmen. Diese Modelle werden in d Raumzeitdimensionen mit der allgemeinen Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}_i(\not{\partial} + m)\psi_i \pm \frac{g^2}{2N_f}(\bar{\psi}_i\Gamma\psi_i)^2 \quad (5.5)$$

beschrieben, wobei Γ eine aus den Diracschen γ -Matrizen entstandene 4×4 -Matrix ist. Die Kopplungskonstante g^2 hat die kanonische Dimension $(d-2)$ und $i = 1, \dots, N_f$ nummerieren die fermionischen Flavours durch [45]. Das Vorzeichen des zweiten Terms wird immer so ausgewählt, dass die Wechselwirkung zwischen Fermionen und Anti-Fermionen anziehend ist [46].

Ursprünglich wurde dieses Wechselwirkungsmodell von E. Fermi im Jahre 1934 als eine phänomenologische Theorie für den β -Zerfall eingeführt [47]. In seiner Veröffentlichung¹ hat Fermi versucht, anhand einer Analogie zur Strahlungstheorie der Photonen und unter Verwendung der von W. Pauli vorgeschlagenen Neutrino-Hypothese ein quantitatives Modell der schwachen Wechselwirkung aufzubauen, wobei der zweite Term in (5.5) für die Wechselwirkung zwischen den bei β -Zerfall beteiligten Baryonen und Leptonen im Atom verantwortlich ist. Die Auswirkungen dieser Veröffentlichung auf die moderne Physik sind immens, uns sollte es an der Stelle jedoch reichen, zu bemerken, dass Fermis Muster sich zur Erforschung vieler anderen Wechselwirkungen in der Natur als erfolgreich erwiesen hat [49].

Historisch gesehen sind die nächsten für unsere Untersuchung relevanten Veröffentlichungen von Y. Nambu und G. Jona-Lasinio aus dem Jahr 1961 [50, 51], in denen die beiden Wissenschaftler zum ersten Mal die dynamische Brechung der chiralen Symmetrie in starken Feldern anhand der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_{\text{NJL}} = \bar{\psi}_i(\not{\partial} + m)\psi_i - \frac{g^2}{2N_f} \left[(\bar{\psi}_i\psi_i)^2 - (\bar{\psi}_i\gamma^5\psi_i)^2 \right]$$

und einer mathematischen Analogie zur BCS-Theorie der Supraleitung untersucht haben [46]. Infolge ihrer Analyse haben sie argumentiert, dass die Masse der Dirac-Fermionen aufgrund einer Wechselwirkung zwischen den masselosen „nackten“ Fermionen mit entgegengesetzten Chiralitäten und dementsprechend spontaner Brechung der chiralen Symmetrie zustande kommt [50].

Darauffolgend haben D. Gross und A. Neveu die dynamische Symmetriebrechung im Einfachsten der Vier-Fermi-Modelle mit $\Gamma = \mathbb{1}$ in (1+1) Dimensionen mithilfe funktionaler Methoden untersucht [52]. Beachtet man die Dimension der Kopplungskonstante g^2 , stellt man fest, dass das sogenannte *Gross-Neveu-Modell* in 2 Raumzeitdimensionen renormierbar ist. Die Lagrange-Dichte ist im Limes $m \rightarrow 0$ unter der diskreten chiralen Transformation

$$\psi \rightarrow \gamma^5\psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow -\bar{\psi}\gamma^5.$$

invariant. Gross und Neveu haben festgestellt, dass diese diskrete Symmetrie für jeden beliebigen Wert der fermionischen Flavour-Zahl N_f in (1+1) Dimensionen durch die Erzeugung einer dynamischen Fermionenmasse gebrochen wird [52].

Ein weiteres interessantes Vier-Fermi-Modell wurde 1958 von W. Thirring in (1+1) Dimensionen und für $N_f = 1$ exakt gelöst [53]. Die Symmetrieeigenschaften der chiralen Transformation im sogenannten *Thirring-Modell* mit $\Gamma = \gamma^\mu$ wurde bisher von mehreren wissenschaftlichen Gruppen in (1+1) sowie (2+1) Dimensionen sowohl mithilfe der Monte-Carlo-Methoden [54–56] als auch anhand der Theorie der Renormierungsgruppe [4] untersucht. Bei den Monte-Carlo-Simulationen hat man meistens Staggered-Fermionen verwendet. Die Wirkung ist in diesem

¹Diese war das allerletzte von Fermi veröffentlichte Papier, in dem er ein rein theoretisches Problem behandelt hat. In den folgenden Jahren hat er sich hauptsächlich mit experimenteller Physik beschäftigt [48].

Modell unter der kontinuierlichen chiralen Transformation

$$\psi(x) \rightarrow e^{i\alpha\gamma^5} \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x)e^{i\alpha\gamma^5},$$

invariant. Somit besitzt die Theorie eine $U(1)$ -Symmetrie [56]. Es wird vorhergesagt, dass auch hier die chirale Symmetrie für $N_f < N_{f,kr}$ durch die Erzeugung einer dynamischen Masse spontan gebrochen ist [46].

Zur Erforschung dieser Modelle gibt es unterschiedliche Ansätze. Man kann versuchen anhand der Schwinger-Dyson-Gleichungen eine perturbative Analyse der Symmetrieeigenschaften durchzuführen. Eine weitere Möglichkeit bietet die Large- N_f -Näherung. Die Kopplungskonstante g^2 in (5.5) hat in (2+1) Raumzeitdimensionen die kanonische Dimension -1 , was eine nicht-renormierbare Theorie andeuten würde. Es wurde aber gezeigt, dass diese Modelle in einer Potenzreihe von $1/N_f$ im Limes $N_f \gg 1$ exakt renormierbar sind [54]. Der dritte Weg ist die Anwendung der Monte-Carlo-Methoden [46].

In der vorliegenden Arbeit haben wir die chirale Symmetriebrechung im (2+1)-dimensionalen Gross-Neveu- und Thirring-Modell anhand von rHMC-Simulationen unter Verwendung der SLAC-Ableitung untersucht. In den nächsten beiden Abschnitten diskutieren wir die Ergebnisse der numerischen Simulationen. Die Simulationen für diese Arbeit wurden zum größten Teil auf dem Cluster *Omega* und Compute-Server *Meggy* des Universitätsrechenzentrums durchgeführt. Dabei wurden mehr als 20000 CPU-Stunden gebraucht.

5.3. Gross-Neveu-Modell

Wie vorher erwähnt, wird das Gross-Neveu-Modell durch die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_{GN} = \bar{\psi}_i(\not{\partial} + m)\psi_i - \frac{g^2}{2N_f}(\bar{\psi}_i\psi_i)^2 \quad (5.6)$$

beschrieben. Eine Summation über N_f fermionische Flavours wird dabei vorausgesetzt. Im chiralen Limes $m \rightarrow 0$ ist Gleichung (5.6) unter der diskreten chiralen Transformation invariant. Um diese Tatsache zu erklären, betrachten wir den Vier-Fermi-Term $(\bar{\psi}\psi)^2$. Nun wenden wir die in (5.3) beschriebene kontinuierliche chirale Transformation auf die fermionischen Felder $\bar{\psi}$ und ψ an,

$$(\bar{\psi}\psi)^2 \rightarrow (\bar{\psi}e^{2i\alpha\gamma^5}\psi)(\bar{\psi}e^{2i\alpha\gamma^5}\psi).$$

Die Darstellung der Exponentialfunktion als Potenzreihe ergibt

$$\begin{aligned} e^{2i\alpha\gamma^5} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2i\alpha)^n}{n!} (\gamma^5)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2i\alpha)^{2n}}{(2n)!} (\gamma^5)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2i\alpha)^{2n+1}}{(2n+1)!} (\gamma^5)^{2n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2i\alpha)^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2i\alpha)^{2n+1}}{(2n+1)!} \gamma^5 \\ &= \cos(2\alpha) + i\gamma^5 \sin(2\alpha), \end{aligned}$$

wobei wir die Eigenschaften der γ^5 -Matrix bzw. die Entwicklung der Sinus- und Kosinus-Funktion verwendet haben. Der Vier-Fermi-Term bleibt daher invariant, wenn $\alpha = n\pi/2$. Eine ähnliche Rechnung zeigt, dass die eigentliche chirale Transformation,

$$e^{i\alpha\gamma^5} = \cos(\alpha) + i\gamma^5 \sin(\alpha),$$

mit den oben berechneten Wert von α zu der folgenden diskreten Transformation wird

$$\psi \rightarrow \pm i\gamma^5\psi.$$

Im Vier-Fermi-Term taucht $\pm i$ nur in der vierten Ordnung auf. Daher kann man es weglassen und schreiben

$$\psi \rightarrow \gamma^5 \psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow -\bar{\psi} \gamma^5.$$

Im Kapitel 4 haben wir jedoch gesehen, dass eine Monte-Carlo-Simulation der Fermionen erst möglich wird, wenn die Wirkung eine Bilinearform besitzt und man die fermionischen Felder analytisch ausintegrieren kann. Die Umwandlung von (5.6) in eine Bilinearform realisiert man durch die *Hubbard-Stratonovich-Transformation* [57, 58]. Dazu betrachten wir zunächst die Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \exp \left[- \int_x \bar{\psi}_i (\not{\partial} + m) \psi_i + \int_x \frac{g^2}{2N_f} (\bar{\psi}_i \psi_i)^2 \right]. \quad (5.7)$$

Den zweiten Term in der Exponentialfunktion können wir nun durch ein Gaußsches Integral über ein skalares bosonisches Feld σ ausdrücken,

$$\exp \left[\int_x \frac{g^2}{2N_f} (\bar{\psi} \psi)^2 \right] \propto \int \mathcal{D}\sigma \exp \left[- \int_x \frac{N_f}{2g^2} \sigma^2 - \int_x \bar{\psi}_i \sigma \psi_i \right].$$

Somit schreibt man (5.7) um und erhält ein Integral über das bosonische Feld σ ,

$$\begin{aligned} Z &= C \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\sigma \exp \left[- \int_x \bar{\psi}_i D[\bar{\psi}, \psi, \sigma] \psi_i - \int_x \frac{N_f}{2g^2} \sigma^2 \right] \\ &= C' \int \mathcal{D}\sigma (\det D) \exp \left[- \int_x \frac{N_f}{2g^2} \sigma^2 \right]. \end{aligned}$$

Dabei sind C und C' Integrationskonstanten und $D[\bar{\psi}, \psi, \sigma] \equiv \not{\partial} + m + \sigma$ [46]. Dies würde heißen, dass man statt (5.6) mit der äquivalenten Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_{\text{GN}} = \bar{\psi}_i (\not{\partial} + \sigma + m) \psi_i + \frac{N_f}{2g^2} \sigma^2 \quad (5.8)$$

arbeiten kann. Sie erfüllt im chiralen Limes die \mathbb{Z}_2 -Symmetrie:

$$\psi \rightarrow \gamma^5 \psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow -\bar{\psi} \gamma^5, \quad \text{und} \quad \sigma \rightarrow -\sigma.$$

Ein Zeichen für die Symmetriebrechung im chiralen Limes ist ein nicht-verschwindender Erwartungswert des Skalarfeldes, $\Sigma \equiv \langle \sigma \rangle$. Beachtet man die Form der Lagrange-Dichte in (5.8), wird klar, dass die fermionische Felder in der asymmetrischen Phase eine dynamische Masse $m_d \simeq \Sigma$ erhalten [46]. Dies haben wir tatsächlich in unseren Ergebnissen beobachtet. Ein Beispiel dafür sieht man in Abbildung 5.1a. Hier ist das System für $g^2 < g_{\text{kr}}^2$ in der symmetrischen Phase und der Erwartungswert von σ verschwindet. Im kritischen Punkt g_{kr}^2 erlebt das System einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Der Ordnungsparameter Σ nimmt entsprechend einen endlichen Wert an. Die Verbindung zwischen $\langle \sigma \rangle$ und dem chiralen Kondensat $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ wird durch die *Ward-Identität* veranschaulicht. Dazu betrachten wir die Zustandssumme

$$Z = C \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\sigma \exp \left[- \int_x \bar{\psi}_i (\not{\partial} + \sigma) \psi_i - \int_x \frac{N_f}{2g^2} \sigma^2 \right].$$

Die funktionale Ableitung der Zustandssumme nach σ muss verschwinden,

$$\begin{aligned} 0 &= C \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\sigma \frac{\delta}{\delta \sigma} e^{- \int_x \bar{\psi}_i (\not{\partial} + \sigma) \psi_i - \int_x \frac{N_f}{2g^2} \sigma^2} \\ &= C \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\sigma \left(-\bar{\psi}_i \psi_i - \frac{N_f}{g^2} \sigma \right) \delta \sigma e^{- \int_x \bar{\psi}_i (\not{\partial} + \sigma) \psi_i - \int_x \frac{N_f}{2g^2} \sigma^2}. \end{aligned}$$

Dies besagt, dass

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle = \frac{N_f}{g^2} \langle \sigma \rangle \quad (5.9)$$

Im letzten Schritt haben wir von der Tatsache Gebrauch gemacht, dass die Beträge von $\langle \sigma \rangle$ und $\langle -\sigma \rangle$ aufgrund der \mathbb{Z}_2 -Symmetrie identisch sind [59]. Wie es in Abbildung 5.1b zu sehen ist, sind unsere numerischen Ergebnisse in guter Übereinstimmung mit der hergeleiteten Ward-Identität. Im weiteren Verlauf des Abschnittes verwenden wir daher nur das chirale Kondensat, um die Ergebnisse darzustellen.

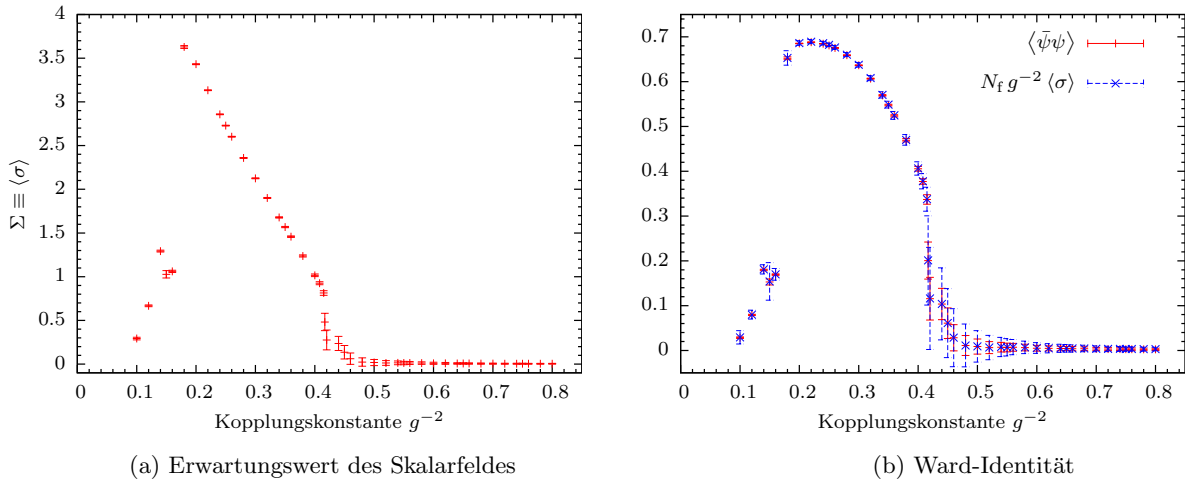


Abbildung 5.1.: (a) Der Erwartungswert des skalaren Feldes σ wurde für verschiedene Werte der Kopplungskonstante g^{-2} im Gross-Neveu-Modell mit $N_f = 1$ aufgezeichnet. Der Ordnungsparameter Σ ist in der symmetrischen Phase $g^2 < g_{\text{kr}}^2$ gleich Null. Sobald die diskrete Symmetrie gebrochen wird, nimmt Σ nicht-verschwindende Werte an. (b) Die Ward-Identität (5.9) zeigt die Verbindung zwischen dem Erwartungswert des Skalarfeldes $\langle \sigma \rangle$ und dem chiralen Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$. Die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit (5.9) ist offensichtlich. Die Erwartungswerte der Observablen wurden auf einem $7^2 \times 8$ -Gitter berechnet.

In Abbildung 5.2 sind die anhand der Simulationen berechneten Werte des chiralen Kondensats für $N_f = 1, 2$ und 10 dargestellt. Die Existenz einer kritischen Kopplungskonstante g_{kr}^2 ist für alle drei N_f -Werte offensichtlich. Für $g^2 > g_{\text{kr}}^2$ ist die Theorie unter der diskreten chiralen Transformation invariant. Daher verschwindet $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$. Erreicht das System den kritischen Punkt g_{kr}^2 , wird die \mathbb{Z}_2 -Symmetrie durch die Erzeugung einer dynamischen Masse gebrochen. Das chirale Kondensat ist dann ungleich Null. Des Weiteren erkennt man, dass die kritische Kopplungskonstante g_{kr}^{-2} mit steigendem N_f auf der Achse nach rechts verschoben wird.

Da man die Simulationen bei solchen Untersuchungen auf einem endlichen Gitter durchführen muss, sind die Effekte des endlichen Volumens unvermeidbar. Um diese zu untersuchen, haben wir die Simulationen auf vier verschiedenen Gittergrößen $5^2 \times 6$, $7^2 \times 8$, $11^2 \times 12$ und $15^2 \times 16$ laufen lassen. Eine Bemerkung bezüglich der ausgewählten Gittergrößen ist an dieser Stelle notwendig. Als wir die SLAC-Ableitung in Kapitel 3 eingeführt haben, haben wir gesagt, dass eine periodische Wellenfunktion eine ungerade Anzahl an Gitterpunkten benötigt. Rechnet man die Ableitung mit einer geraden Anzahl an Gitterpunkten, erhält man eine antiperiodische Wellenfunktion. Die fermionische Wellenfunktionen müssen immer antisymmetrisch sein, damit die Fermi-Dirac Statistik erfüllt wird. Aus diesem Grunde haben wir in dieser Arbeit in der Zeitrichtung durchgehend eine gerade Anzahl an Gitterpunkten und in den Raumrichtungen eine ungerade Anzahl an Gitterpunkten.

Einen Vergleich zwischen den Ergebnissen auf Gittern unterschiedlicher Größe kann man am besten mithilfe der Abbildung 5.3 ziehen. Hier stellt man fest, dass ein signifikanter Unterschied

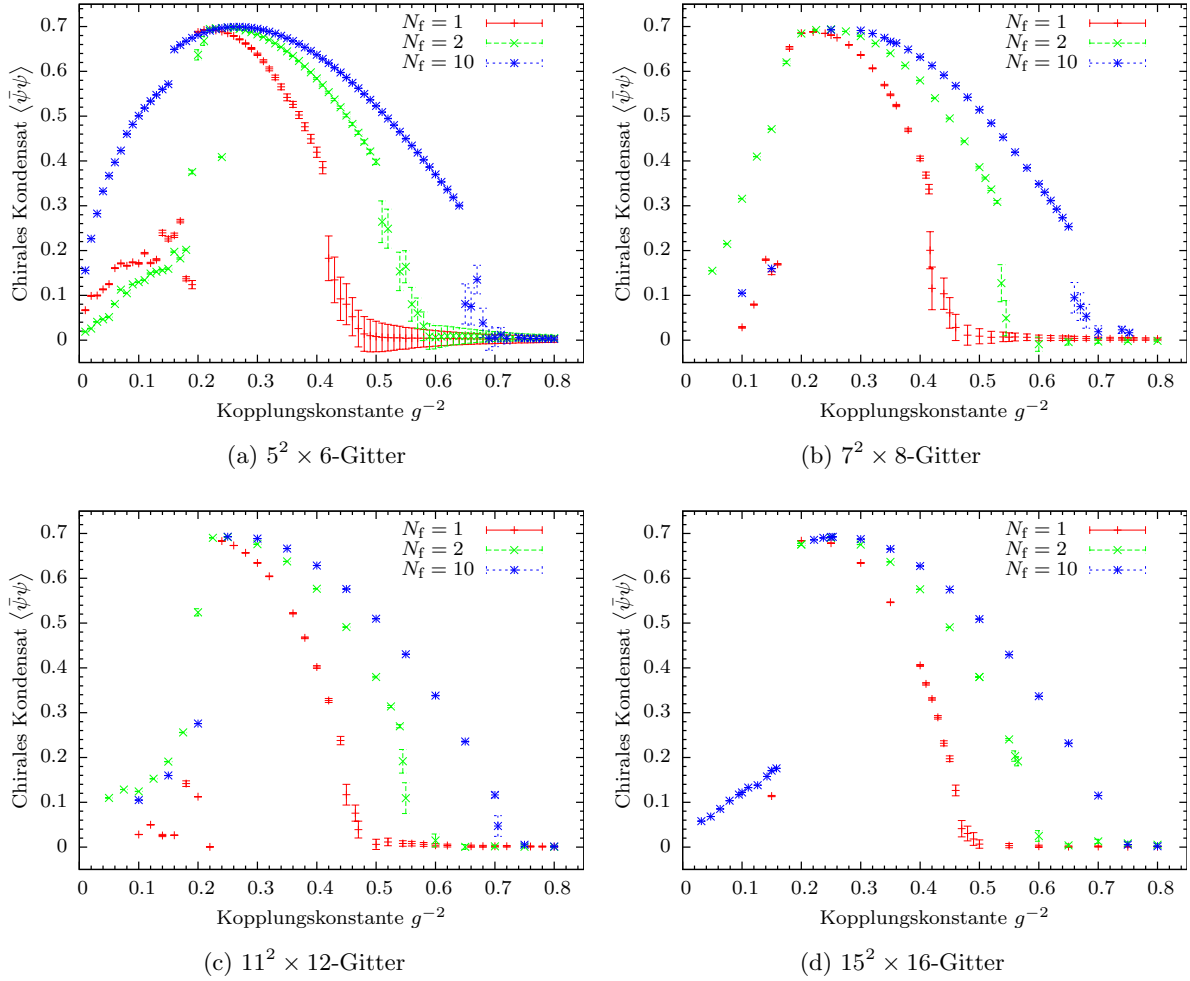


Abbildung 5.2.: Die anhand der Simulationen gemessenen Werte des chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ in Abhängigkeit von der Kopplungskonstante g^{-2} sind für $N_f = 1, 2$ und 10 aufgetragen. Eine Brechung der diskreten chiralen Symmetrie ist für alle drei N_f -Werte zu sehen.

nur in der Umgebung des Übergangspunkts zu sehen ist. Der kritische Punkt wird bei steigender Gittergröße leicht nach rechts verschoben.

Unsere Messungen auf dem $11^2 \times 12$ -Gitter geben uns die Möglichkeit, den kritischen Exponenten β zu bestimmen. Die Wahl der Gittergröße ist zunächst dadurch bedingt, dass sie relativ groß ist, womit die Effekte des endlichen Volumens bereits recht klein sind (siehe Abb. 5.3). Der zweite und vielleicht noch wichtigere Grund ist die Tatsache, dass uns auf diesem Gitter eine ausreichende Anzahl Messpunkte in der Nähe des kritischen Punkts zur Verfügung stehen.

Zur Bestimmung des kritischen Exponenten gehen wir davon aus, dass der Ordnungsparameter in der Nähe des kritischen Punkts proportional zu dem folgenden „singulären“ Anteil ist

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle \propto |\varepsilon|^\beta,$$

wobei wir die reduzierte Kopplungskonstante

$$\varepsilon \equiv \frac{1}{g_{\text{kr}}^2} - \frac{1}{g^2}$$

verwendet haben [54]. Nun können wir den berechneten Werten des chiralen Kondensats in einer kleinen Umgebung von g_{kr}^2 eine Kurve anpassen und den Wert von β auslesen (siehe Abb. 5.4 links). Dabei gibt es jedoch ein Hindernis. Der genaue Wert der kritischen Kopplungskonstante ist uns nicht bekannt. Als ein Lösungsansatz für dieses Problem betrachten wir ein kleines

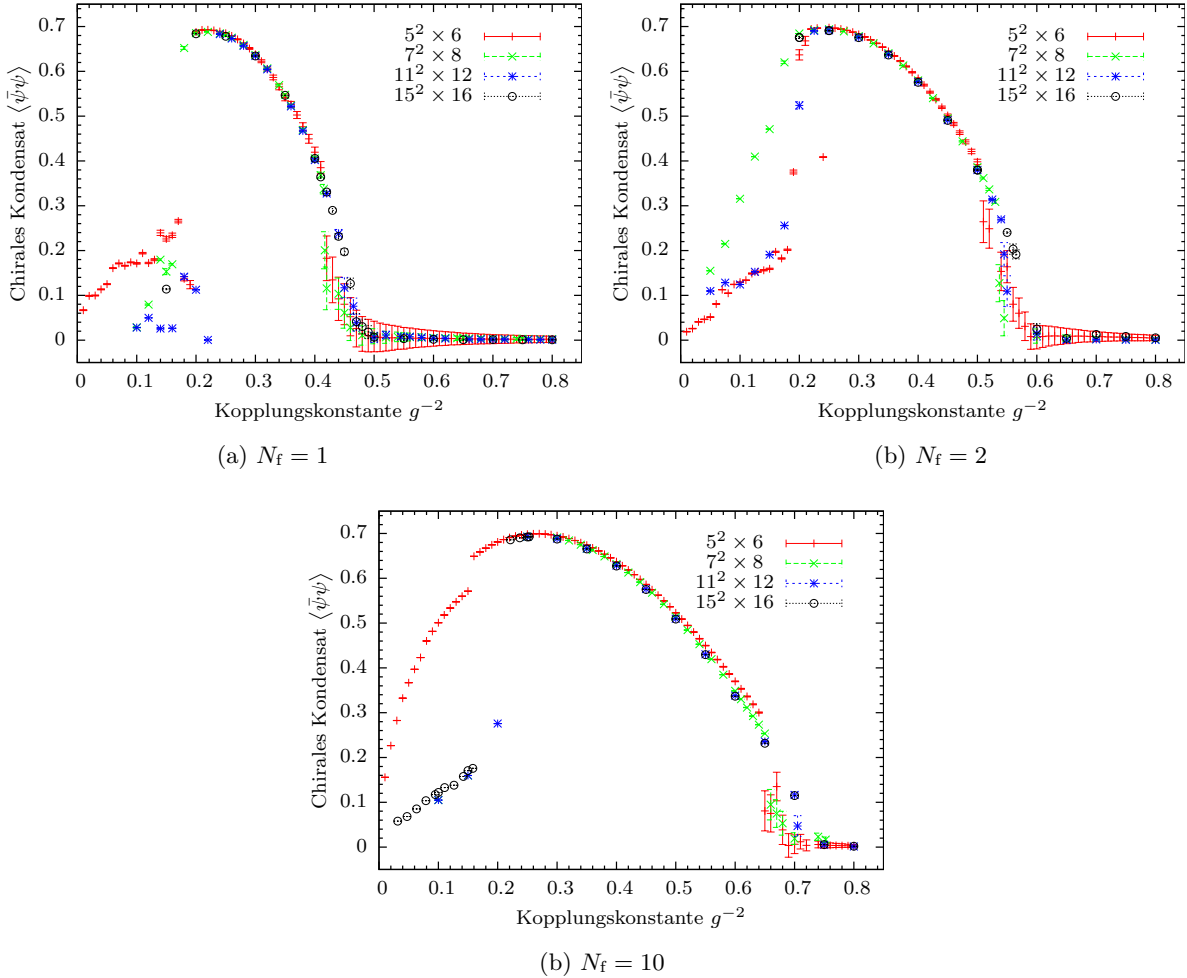


Abbildung 5.3.: In jedem Diagramm sind die gemessenen Werte des chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ in Abhängigkeit von der Kopplungskonstante g^{-2} auf Gittern mit unterschiedlichen Volumina aufgetragen. Hier sieht man, dass der kritische Punkt mit steigendem Gittervolumen leicht nach rechts verschoben wird.

Intervall, in dem sich der kritische Punkt mit großer Wahrscheinlichkeit befindet. Wir haben dann den Wert von β für 11 verschiedene Einschätzungen von g_{kr}^{-2} bestimmt (siehe Abb. 5.4 rechts). Dabei nehmen wir denjenigen Wert von β als die beste Einschätzung an, der zu den mittigen Wert von g_{kr}^{-2} gehört. Die weiteren 10 Punkte auf beiden Seiten von diesem Mittelpunkt geben uns eine Einschätzung des systematischen Fehlers bei dieser Messung. Die Ergebnisse sind in der Tabelle 5.1 aufgelistet. Zum Vergleich erwähnen wir den mithilfe der Mean-Field-Näherung berechneten Wert des kritischen Exponenten. Er beträgt $1/2$ und ist unabhängig von der Anzahl der Raumzeitdimensionen [16]. Unsere Ergebnisse haben eine gute Übereinstimmung mit dem Mean-Field-Wert von β . Die Bestimmung von β auf größeren Gittern wird unsere Abschätzung bestimmen verbessern, wir erwarten jedoch nicht, dass man hier eine großartige Änderung des β -Wertes beobachten wird.

N_f	1	2	10
β	0.54766 ± 0.06524	0.48876 ± 0.03372	0.48605 ± 0.07381

Tabelle 5.1.: Die berechneten Werte des kritischen Exponenten β bei dem Phasenübergang zweiter Ordnung im Gross-Neveu-Modell auf dem $11^2 \times 12$ -Gitter.

Nachdem wir unsere numerischen Ergebnisse für das Gross-Neveu-Modell vorgestellt haben gehen wir im nächsten Abschnitt dieses Kapitels auf unsere Ergebnisse im Thirring-Modell ein.

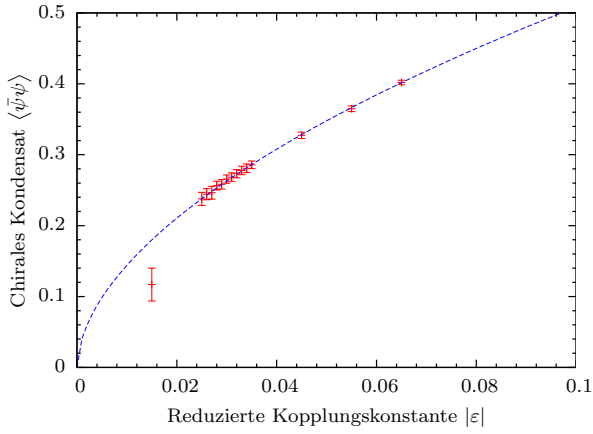
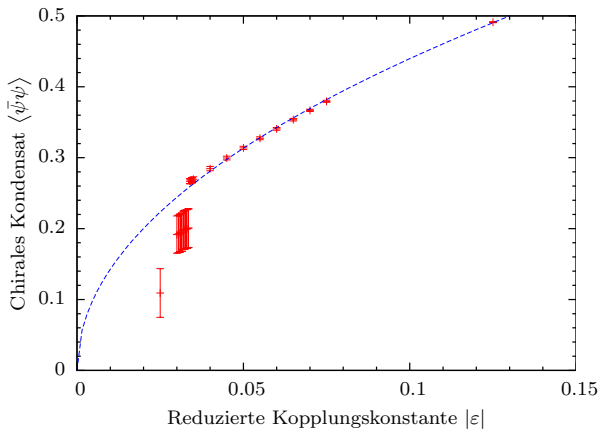
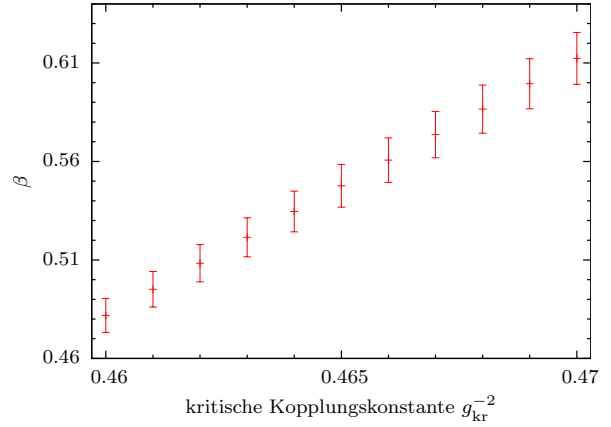
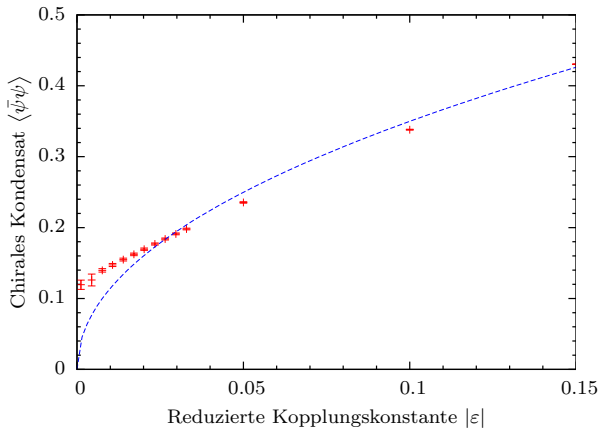
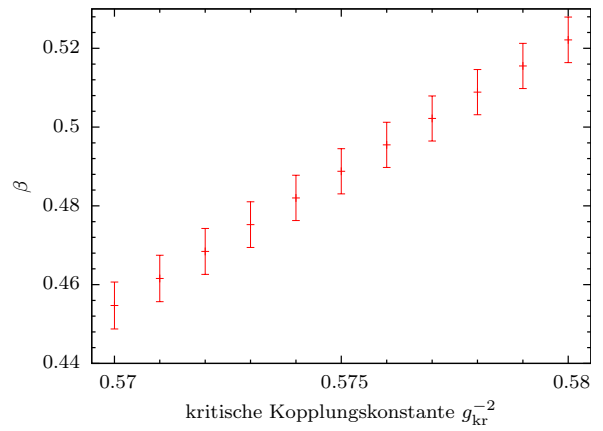
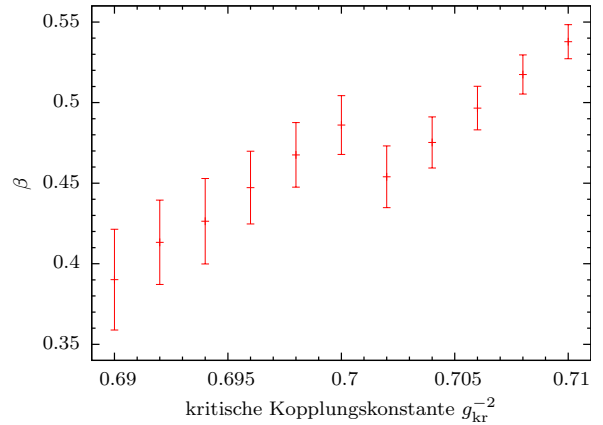
(a) $N_f = 1$ (b) $N_f = 2$ (c) $N_f = 10$ 

Abbildung 5.4.: **Links:** Der Wert des kritischen Exponenten β wird durch eine Anpassung der im Gross-Neveu-Modell gemessenen Erwartungswerte des chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ in der Nähe des Übergangspunkts an eine Kurve bestimmt. Die Erwartungswerte wurden auf dem $11^2 \times 12$ -Gitter berechnet. **Rechts:** Um eine Abschätzung des systematischen Fehlers bei der Bestimmung von β anzuführen, haben wir nach einem Intervall gesucht, in dem die kritische Kopplungskonstante g_{kr}^{-2} mit großer Wahrscheinlichkeit liegt. Dann haben wir den Wert von β für 11 Punkte in diesem Intervall bestimmt. Der für das in der Mitte des Intervalls stehende g_{kr}^{-2} berechneten Wert wird dabei als die beste Einschätzung angenommen.

5.4. Thirring-Modell

Im Thirring-Modell wechselwirken die Fermionen durch erhaltene Vektorströme miteinander. Daher wird das Modell durch die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_{\text{Th}} = \bar{\psi}_i(\not{\partial} + m)\psi_i + \frac{g^2}{2N_f}(\bar{\psi}_i\gamma^\mu\psi_i)^2 \quad (5.10)$$

beschrieben. Ähnlich zu dem Gross-Neveu-Modell können wir die Lagrange-Dichte (5.10) durch die Einführung eines Vektorfeldes A_μ und die Hubbard-Stratonovich-Transformation in eine Bilinearform überführen. Man erhält dann

$$\mathcal{L}_{\text{Th}} = \bar{\psi}_i(\not{\partial} + i\not{A} + m)\psi_i + \frac{N_f}{2g^2}A_\mu^2, \quad \not{A} \equiv \gamma^\mu A_\mu.$$

Wie vorher erwähnt, besitzt diese Theorie im chiralen Limes $m \rightarrow 0$ die kontinuierliche $U(1)$ -Symmetrie.

Unser Ziel bestand auch hier darin, die spontane Brechung der chiralen Symmetrie zu untersuchen. Dazu haben wir uns zunächst, wie im vorangegangenen Fall, das chirale Kondensat angeschaut. Unsere Versuche, einen nicht-verschwindenden Wert für $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ zu messen, haben sich jedoch im Gegensatz zum Gross-Neveu-Modell als nicht erfolgreich erwiesen. Beispiele dazu sind in Abbildung 5.5 zu sehen. Der Grund liegt höchstwahrscheinlich darin, dass die kontinuierliche chirale Transformation von fermionischen Feldern keinen Einfluss auf das Vektorfeld A_μ hat. Beim ausintegrieren der fermionischen Felder in (4.5) summieren wir eigentlich über alle Konfigurationen dieser Felder. Dies führt dazu, dass der gemessene Wert des Ordnungsparameters verschwindet. Die Situation im Gross-Neveu-Modell war anders. Dort müsste man nämlich die zusätzliche Transformation $\sigma \rightarrow -\sigma$ vornehmen, um die chirale Invarianz der Lagrange-Dichte nach der Hubbard-Stratonovich-Transformation beizubehalten. In der Tat haben wir aber in den Simulationen die \mathbb{Z}_2 -Transformation des σ -Feldes nicht respektiert, das heißt, wir haben immer nur mit dem positiven σ -Feld gearbeitet. Damit haben wir eines der beiden Minima des effektiven Potentials ausgewählt.

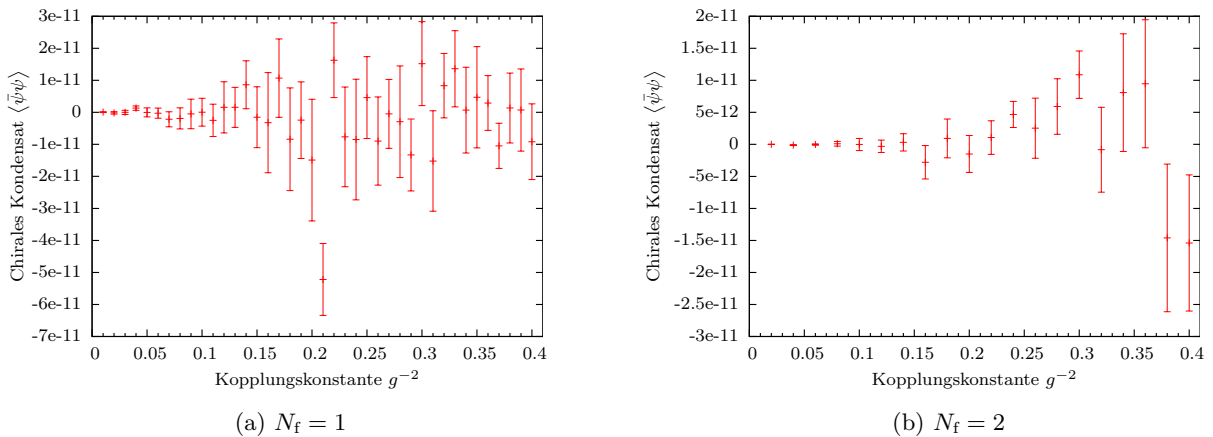


Abbildung 5.5.: Unsere Messungen des chiralen Kondensats $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ im Thirring-Modell haben für alle von uns untersuchten N_f einen verschwindenden Wert aufgewiesen. Als Beispiele haben wir dieses Verhalten für $N_f = 1$ und $N_f = 2$ in den obigen Diagrammen dargestellt.

Eine weitere Observable, mit der wir uns einen Überblick über die Symmetrieeigenschaften des Systems verschaffen können, ist die chirale Suszeptibilität

$$\chi = \frac{1}{V} \sum_{x,y} \langle\bar{\psi}\psi(x)\bar{\psi}\psi(y)\rangle,$$

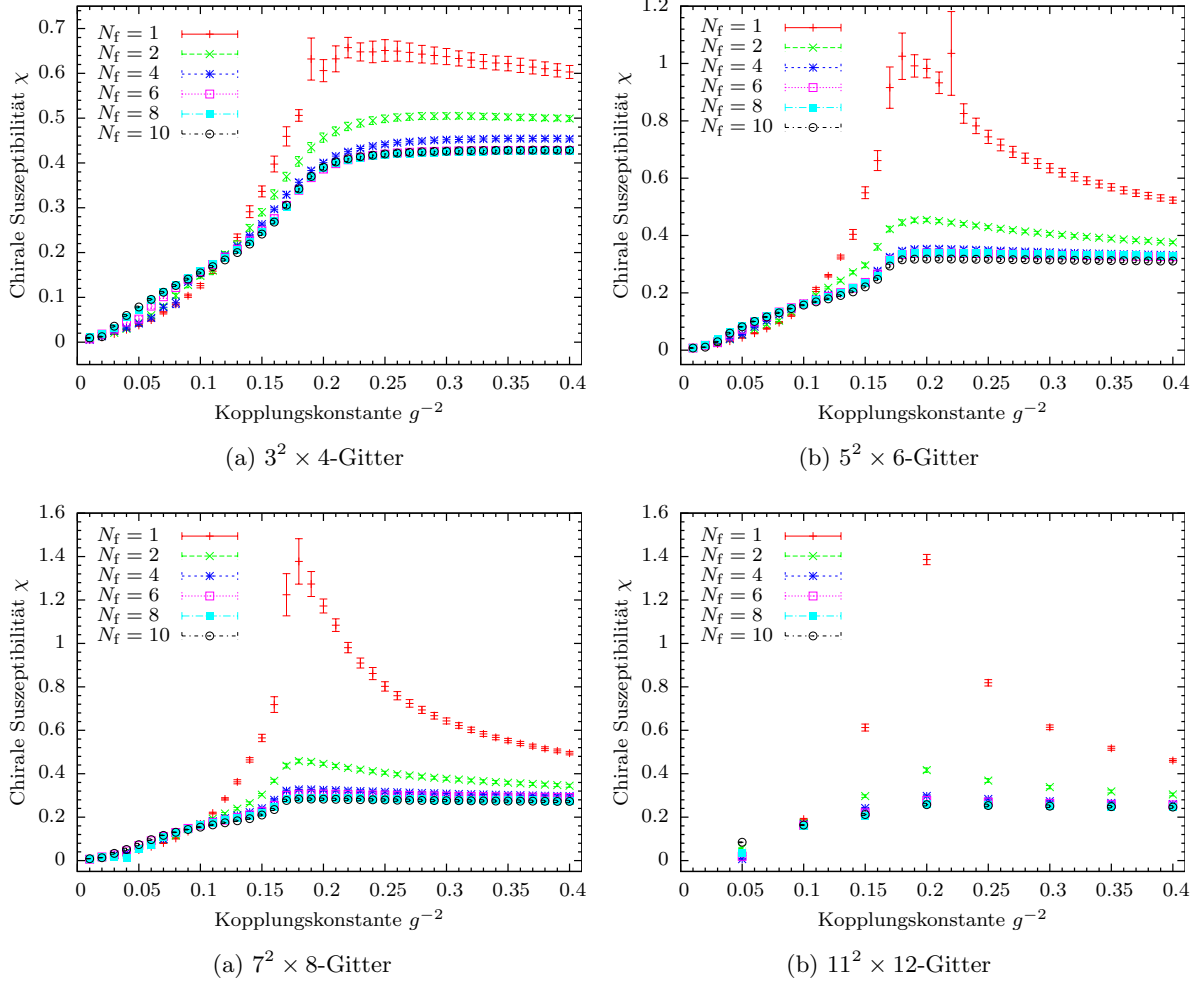


Abbildung 5.6.: Die anhand der Simulationen gemessenen Werte der chiralen Suszeptibilität χ im Thirring-Modell sind in Abhängigkeit von der Kopplungskonstante g^{-2} für $N_f = 1, 2, 4, 6, 8$ und 10 aufgetragen.

wobei V das Gittervolumen bezeichnet [46]. Die Erwartungswerte dieser Observable haben wir für das Thirring-Modell berechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.6 dargestellt.

Bevor wir die Diskussion der Ergebnisse weiterführen, möchten wir darauf hinweisen, dass die Thirring-Simulationen im Vergleich zum Gross-Neveu-Modell viel mehr CPU-Zeit in Anspruch genommen haben. Dementsprechend mussten wir unsere Untersuchungen auf kleinere Gitter beschränken. Auf dem von uns verwendeten größten Gitter konnten wir in der verfügbaren Zeit nicht genügend Messpunkte erhalten. Dies ist problematisch, weil die Effekte des endlichen Volumens im Thirring-Modell viel schärfer auftreten. Diese Bemerkung besagt, dass unsere Aussagen über das kritische Verhalten des Thirring-Modells in (2+1) Dimensionen mit Vorbehalt wahrzunehmen sind.

Ein Vergleich der Messungen der chiralen Suszeptibilität auf unterschiedlichen Gittern zeigt, dass sich das Plateau auf dem $3^2 \times 4$ -Gitter für $N_f = 1$ mit steigendem Gittervolumen in einen Peak entwickelt (siehe Abb. 5.7a). Dieses Verhalten ist für $N_f = 2$, wie es in Abbildung 5.7b dargestellt wurde, viel schwächer. Da die Suszeptibilität im kritischen Punkt divergieren soll [16], können wir davon ausgehen, dass ein Phasenübergang zweiter Ordnung für $N_f = 1$ und höchstwahrscheinlich auch für $N_f = 2$ stattfindet. Einen Peak sieht man aber für $N_f \geq 4$ gar nicht, auch wenn man das Gitter größer macht (siehe Abb. 5.8). Die chirale Suszeptibilität steigt im Fall mit steigendem Wert der Kopplungskonstante bis sie ein Plateau erreicht.

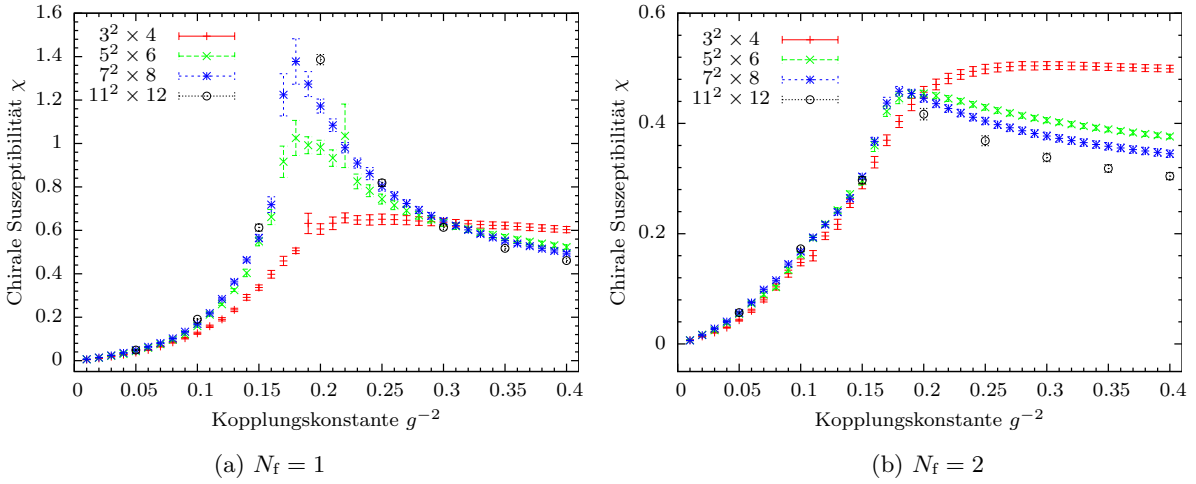


Abbildung 5.7.: In jedem Diagramm sind die gemessenen Werte der chiralen Suszeptibilität χ in Abhängigkeit von der Kopplungskonstante g^{-2} im Thirring-Modell auf Gittern mit unterschiedlichen Volumina aufgetragen. (a) Für $N_f = 1$ kann man mit gewisser Sicherheit von einer Phasenübergang zweiter Ordnung reden. Das divergierende Verhalten der chiralen Suszeptibilität wird mit steigendem Gittervolumen deutlicher. (b) Der Peak ist für $N_f = 2$ nicht mehr genauso scharf, wie man es für $N_f = 1$ beobachtet. Es ist aber sehr wahrscheinlich, dass hier auch einen Phasenübergang stattfindet. Dies kann man aber erst anhand Simulationen auf größeren Gittern sicherstellen.

Die Änderungen der Form dieses Plateaus unterscheidet sich aber in einem hohen Maße von dem, was man für $N_f = 1$ und $N_f = 2$ beobachtet. Wir würden daher vermuten, dass die kritische Flavour-Zahl $N_{f,kt}$ irgendwo zwischen $N_f = 2$ und $N_f = 4$ liegt.

Die Lösungen der Schwinger-Dyson-Gleichungen im Kontinuum sagen eine spontane Brechung der chiralen Symmetrie für $N_f < 4.32$ im Thirring-Modell vorher [60]. Diese Aussage stimmt relativ gut mit unseren Ergebnissen überein. Die Aussagen über die kritische Flavour-Zahl im Thirring-Modell sind jedoch zum Teil umstritten. Die Large- N_f -Näherung besagt zum Beispiel, dass eine Symmetriebrechung für alle N_f -Werte möglich ist [60]. Diese Näherung ist aber für kleine N_f nicht unbedingt gültig. Eine Untersuchung dieser Fragestellung mithilfe der Theorie der Renormierungsgruppe ergab $N_{f,kr} = 5.1 \pm 1$ [61]. Die Monte-Carlo-Methoden haben in den 1990er Jahren eine Symmetriebrechung für $N_f < 5$ vorgeschlagen. Dieser Wert wurde anhand der neueren Simulationen auf größeren Gittern auf $N_{f,kr} = 6$ erhöht [60]. Dies lässt vermuten, dass unsere Simulationen auf größeren Gittern als bisher betrachtet ebenfalls größere $N_{f,kr}$ ergeben können.

Zum Schluss kommen wir zur Bestimmung des kritischen Exponenten der Suszeptibilität. In der Nähe eines Phasenübergangs zweiter Ordnung hat die Suszeptibilität ein singuläres Verhalten, das durch

$$\chi \propto |\varepsilon|^{-\gamma}$$

beschrieben wird. Eine systematische Berechnung dieses Exponenten ist aufgrund nicht-hinreichender Messpunkte auf dem $11^2 \times 12$ -Gitter und der starken Änderung der Peak-Höhe mit steigendem Volumen leider nicht möglich. Eine sehr grobe Einschätzung auf dem $7^2 \times 8$ -Gitter beträgt $\gamma = -0.34$. Dies liegt in der gleichen Größenordnung wie in der Mean-Field-Näherung, wobei $\gamma = -1$ ist.

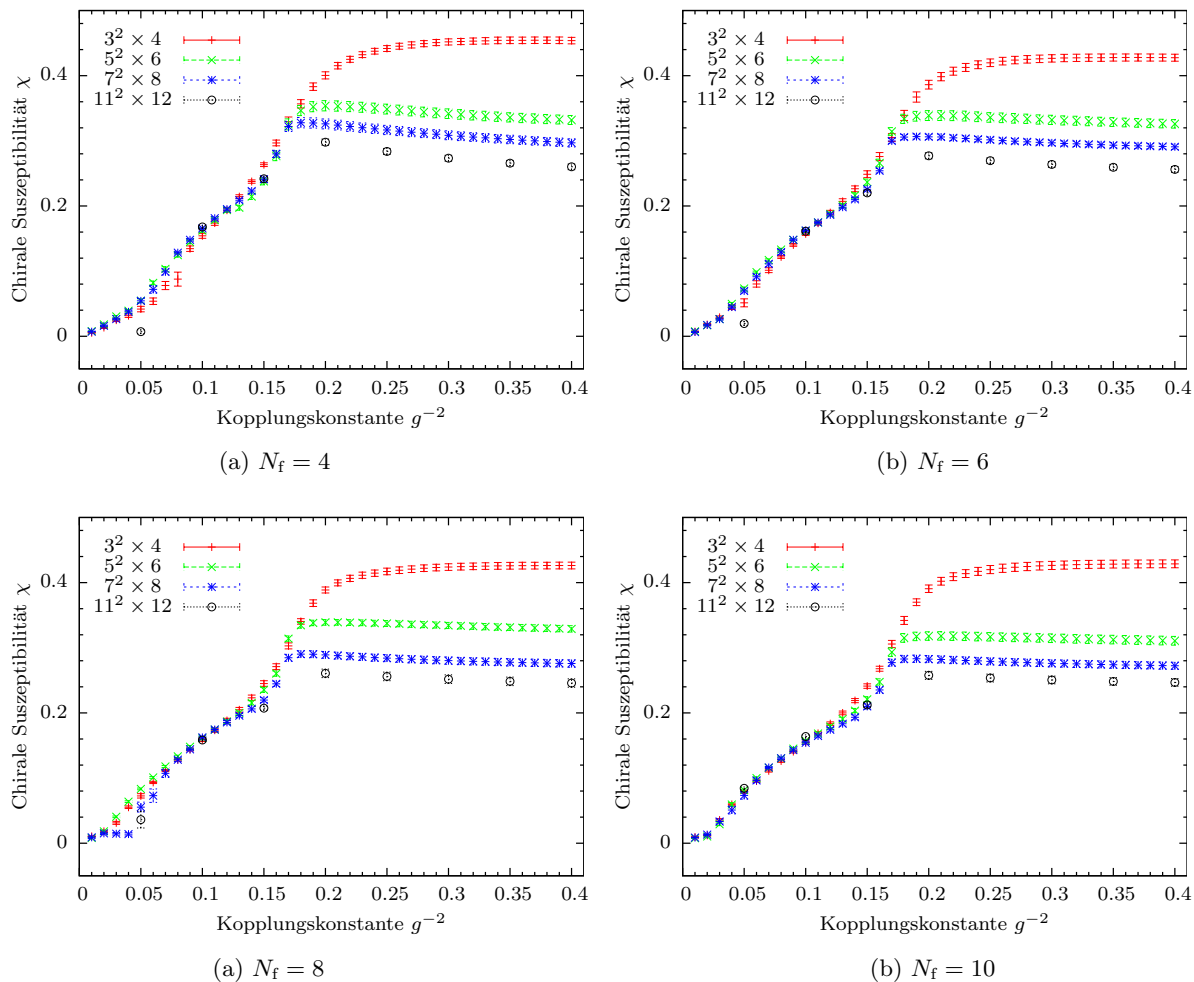


Abbildung 5.8.: In jedem Diagramm sind die gemessenen Werte der chiralen Suszeptibilität χ in Abhängigkeit von der Kopplungskonstante g^{-2} im Thirring-Modell auf Gittern mit unterschiedlichen Volumina aufgetragen. Im Gegensatz zu dem Fall von $N_f = 1$ bzw. $N_f = 2$ beobachtet man für $N_f \geq 4$ keinen Peak. Die Variation der Kurven mit steigendem Gittervolumen ist nicht genauso stark und die Plateau-Form der Kurven wird mehr oder weniger beibehalten.

6 | Epilog

In dieser Arbeit haben wir das kritische Verhalten des (2+1)-dimensionalen Gross-Neveu- und Thirring-Modells anhand von Monte-Carlo-Simulationen untersucht. Dabei haben wir den rHMC-Algorithmus und den SLAC-Ableitungsoperator verwendet.

Im Falle des Gross-Neveu-Modells haben wir die chirale Symmetriebrechung für fermionische Flavour-Zahlen $N_f = 1, 2$ und 10 untersucht. Die Simulationen haben wir auf Gittern mit unterschiedlichen Volumina durchgeführt. Wir haben dabei festgestellt, dass für alle drei Werte von N_f eine Brechung der diskreten chiralen Symmetrie zu beobachten ist, die einen Phasenübergang zweiter Ordnung signalisiert. Der Übergangspunkt wird mit steigender Flavour-Zahl auf der Achse nach rechts verschoben. Die Effekte des endlichen Volumens waren im Gross-Neveu-Modell nicht sehr groß. Einen Unterschied ist nur in der unmittelbaren Umgebung des kritischen Punktes bemerkbar. Der anhand unserer Simulationsergebnisse bestimmte Wert des kritischen Exponenten β hat eine gute Übereinstimmung mit dem berechneten Wert von β in der Mean-Field-Näherung.

Des Weiteren haben wir die spontane Brechung der kontinuierlichen chiralen $U(1)$ -Symmetrie im Thirring-Modell für fermionische Flavour-Zahlen $N_f = 1, 2, 4, 6, 8$ und 10 erforscht. Diese Theorie ist sehr interessant, denn nach Lösungen von Schwinger-Dyson-Gleichungen und mancher Monte-Carlo-Untersuchungen sollte es in diesem Modell eine kritische Flavour-Zahl $N_{f,kr}$ geben, bei der die Symmetriebrechung aufhört, das heißt, für $N_f > N_{f,kr}$ wird keine spontane Brechung der chiralen Symmetrie erwartet. Unsere Messungen des chiralen Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ konnten uns leider nicht weiterbringen, da die Erwartungswerte dieser Größe immer verschwinden. Daher haben wir die chirale Suszeptibilität untersucht. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass eine Brechung der chiralen Symmetrie für $N_f = 1$ und höchstwahrscheinlich für $N_f = 2$ stattfindet. Die Volumeneffekte treten bei den Messungen der chiralen Suszeptibilität viel stärker auf. Es ist daher möglich, dass man auf viel größeren Gittern eine Symmetriebrechung auch für größere Werte von N_f beobachten würde. Aus diesem Grunde können wir nur mit Vorsicht sagen, dass die kritische Flavour-Zahl $N_{f,kr}$ zwischen 2 und 4 liegen soll.

Der erste Schritt in der Zukunft wäre die Hinzunahme einer winzigen nackten Fermionenmasse zu den Simulationsparametern. Diese könnte uns helfen, einen besseren Überblick über die Symmetrieeigenschaften des Thirring-Modells durch direkte Untersuchung des chiralen Kondensats als Ordnungsparameter zu verschaffen. Man erwartet, dass die nackte Masse das System in eines der beiden Minima des effektiven Potentials zwingen wird. Sie agiert eigentlich als ein äußeres Feld. Die Ergebnisse aus einer solchen Untersuchung können wir auch zur Bestimmung des kritischen Exponenten δ sowohl im Gross-Neveu- als auch im Thirring-Modell verwenden.

Eine weiterer Vorschlag wäre die Parallelisierung des Programmcodes der SLAC-Ableitung. Wie vorher erwähnt, ist die genaue Betrachtung der Volumeneffekte im Allgemeinen sehr wichtig. Dies ist im Falle des Thirring Modells viel stärker betont. Hierzu muss man die Anzahl der Gitterpunkte in allen Raumzeitdimensionen vergrößern und dabei versuchen, den Ort des Übergangspunkts möglichst gut einzuschätzen. Die Simulationen sind aber in der Nähe der kritischen Punktes rechentechnisch sehr teuer und entsprechend langsam. Die Parallelisierung des SLAC-Codes wird uns ermöglichen, die Zeitdauer der Simulationen zu verringern.

Im Anschluss weisen wir darauf hin, dass der bestehende Code eine Untersuchung jedes Vier-Fermi-Modells mit einer Summe von unterschiedlichen Wechselwirkungstermen ermöglicht.

A | Gamma-Matrizen

A.1. Grundlagen

In der Quantenfeldtheorie sind die Diracschen γ -Matrizen ein unverzichtbares Werkzeug bei der Behandlung der fermionischen Felder. Sie erfüllen eine *Clifford-Algebra*. Dieser Anhang gibt dem Leser einen Überblick über die wichtigsten Eigenschaften dieser Matrizen¹.

Eine 2^d -dimensionale Clifford-Algebra \mathcal{C}_d in d Raumzeitdimensionen wird durch die Matrizen $\{\gamma^\mu\}_{\mu=0}^{d-1}$ erzeugt, wenn sie die Antikommutatorrelationen

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu} \mathbb{1}, \quad \mu, \nu = 0, \dots, d-1 \quad (\text{A.1})$$

erfüllen, wobei $\eta^{\mu\nu}$ die Minkowski-Metrik und $\mathbb{1}$ die Einheitsmatrix bezeichnet [63]. Durch Multiplikation der oben eingeführten Matrizen konstruiert man weiterhin die Matrizen

$$\Gamma^A \in \{\mathbb{1}, \gamma^\mu, \gamma^{\mu\nu}, \gamma^{\mu\nu\rho}, \dots, \gamma^{\mu\nu\rho\dots\omega}\}, \quad (\text{A.2})$$

wobei

$$\begin{aligned} \mu\nu &\equiv \gamma^\mu \gamma^\nu && (\mu < \nu), \\ \gamma^{\mu\nu\rho} &\equiv \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho && (\mu < \nu < \rho), \\ \gamma^{\mu\nu\rho\dots\omega} &\equiv \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \dots \gamma^\omega && (\mu < \nu < \rho < \dots < \omega). \end{aligned}$$

In der Menge (A.2) sind nur die aus geordneten Multiplikationen unterschiedlicher γ -Matrizen entstandenen Produkte enthalten. Anhand (A.1) ist jedes beliebige Produkt von γ -Matrizen in die Form eines Γ^A zu überführen. Des Weiteren definiert man die Ordnung der Matrix Γ^A als die Anzahl der im Produkt (A.2) anwesenden γ -Matrizen. Somit hat $\mathbb{1}$ die Ordnung Null. Das Produkt aller γ -Matrizen

$$\tilde{\gamma} \equiv \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \dots \gamma^{d-1}$$

hat entsprechend die Ordnung d [62].

A.2. Gruppentheoretische Betrachtungen

Die in (A.2) definierten Matrizen $\pm\Gamma^A$ bilden eine endliche Gruppe G der Ordnung 2^{d+1} . Um einige Aussagen über die Darstellungen dieser Gruppe zu treffen, schauen wir uns die Konjugationsklassen der Gruppe etwas näher an.

Mit Hilfe (A.1) ist es einfach zu zeigen, dass für beliebige $\Gamma^A, \Gamma^B \in G$

$$\Gamma^B \Gamma^A \Gamma^B = \pm \Gamma^A, \quad (\text{A.3})$$

und

$$(\Gamma^A)^2 = (-1)^{\frac{1}{2}n(n-1)} \mathbb{1}, \quad (\text{A.4})$$

¹Unsere Diskussion in diesem Anhang basiert auf dem Vorlesungsskript „Field Theory in Particle Physics“ von E. Laenen et al. [62].

gilt, wobei n die Ordnung von Γ^A ist. Das Vorzeichen in (A.3) wird durch die Anzahl der nötigen Permutationen der beteiligten γ -Matrizen bestimmt [62].

Aus (A.3) und (A.4) folgt, dass im Allgemeinen $+\Gamma^A$ und $-\Gamma^A$ eine Klasse bilden, außer wenn Γ^A mit allen Gruppenmitgliedern vertauscht. In so einem Fall gehören $+\Gamma^A$ und $-\Gamma^A$ zwei unterschiedlichen Klassen an. Das triviale mit allen Γ^A 's kommutierende Mitglied der Gruppe G ist $\mathbb{1}$. In ungeraden Raumzeit-Dimensionen vertauscht $\tilde{\gamma}$ ebenfalls mit allen Γ^A 's. Dementsprechend ist die Anzahl der Klassen für gerades d gleich $2^d + 1$, während es in ungeraden Dimensionen $2^d + 2$ Klassen gibt. Es sei an der Stelle noch bemerkt, dass die Kommutatorgruppe von G lediglich aus $\pm\mathbb{1}$ besteht [62].

Uns ist aus der Gruppentheorie bekannt, dass die Anzahl der inäquivalenten irreduziblen Darstellungen einer endlichen Gruppe gleich der Anzahl ihrer Konjugationsklassen ist [64]. Darüber hinaus stellt man die Anzahl der eindimensionalen Darstellungen der Gruppe durch das Teilen der Gruppenordnung durch die Ordnung der Kommutatorgruppe fest. Die Summe der Quadrate der Dimensionen aller irreduziblen Darstellungen ist gleich der Gruppenordnung [62].

Die eindimensionalen Darstellungen der endlichen Gruppe G sind einfache c -Zahlen und erfüllen offensichtlich die Antikommutatorrelationen (A.1) nicht. Demnach besitzt die Clifford-Algebra für gerades d eine irreduzible $2^{\frac{1}{2}d}$ -dimensionale Matrixdarstellung². In ungeraden Dimensionen gibt es dagegen zwei inäquivalente irreduzible Darstellungen mit der Dimension $2^{\frac{1}{2}(d-1)}$ [62].

A.3. Gamma-Matrizen in 4 Dimensionen

Als ein explizites Beispiel möchten wir in diesem Teil auf die γ -Matrizen in 4 Dimensionen eingehen. Wie vorher erwähnt, sind alle Darstellungen der γ -Matrizen unitär äquivalent. Aus diesem Grunde schreiben wir hier nur die in dieser Arbeit verwendete hermitesche *Weyl*- oder *chirale*-Darstellung

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3,$$

mit den Paulischen Matrizen σ^i auf [21]. In Einklang mit dem vorherigen Teilabschnitt bezeichnen wir das geordnete Produkt aller Matrizen als

$$\gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3,$$

mit folgenden Eigenschaften

$$\begin{aligned} (\gamma^5)^\dagger &= \gamma^5, \\ (\gamma^5)^2 &= \mathbb{1}, \\ \{\gamma^5, \gamma^\nu\} &= 0. \end{aligned}$$

In der chiralen Darstellung hat γ^5 eine block-diagonale Form

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} -\mathbb{1} & 0 \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix},$$

die ihrerseits besagt, dass diese Darstellung reduzibel ist [21].

Die obigen Matrizen $\{\gamma^\mu\}_{\mu=0}^3$ erzeugen eine 16-dimensionale Clifford-Algebra mit der Basis $\{\mathbb{1}, \gamma^\mu, \gamma^{\mu\nu}, \gamma^\mu\gamma^5, \gamma^5\}$ [21]. Im Euklidischen Raum verwendet man $\gamma_E^0 = \gamma^0$ und $\gamma_E^i = i\gamma^i$ mit $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\delta^{\mu\nu}\mathbb{1}$, wobei $\delta^{\mu\nu}$ die Euklidische Metrik in 4 Dimensionen bezeichnet [16].

²Alle Darstellungen von G in geraden Dimensionen sind miteinander unitär äquivalent [21].

B | Graßman-Algebra

B.1. Graßmann-Variablen

Die von Hermann Graßmann anfänglich zur Verallgemeinerung des Vektorproduktes auf höhere Dimensionen eingeführten *Graßmann-Variablen* sind heutzutage ein sehr wichtiger Bestandteil der Untersuchungen von Fermionen in der Gitterformulierung der Quantenfeldtheorie [65].

Die Pfadintegral-Darstellung der kommutierenden bosonischen Felder in der Quantenfeldtheorie wird durch die c-Zahlen realisiert. Um die Fermi-Dirac-Statistik zu erfüllen, müssen die fermionischen Feldoperatoren jedoch miteinander antikommutieren. Diese werden im klassischen Limes mit Graßmann-Variablen dargestellt [16]. Im Folgenden bringen wir eine kurze Einführung der Graßmann-Variablen zusammen mit einem Abriss von Techniken zur graßmannwertigen Integration und Ableitung nach diesen Objekten. Einige wichtigen Beispiele werden dabei ausgewertet.

Die Variablen $\{\eta_i, \bar{\eta}_i\}_{i=1}^n$ werden die Erzeuger einer Graßmann-Algebra genannt, wenn sie die folgenden Antikommutatorrelationen erfüllen

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \{\bar{\eta}_i, \bar{\eta}_j\} = \{\eta_i, \bar{\eta}_j\} = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{B.1})$$

Aus (B.1) folgt direkt, dass

$$\eta_i^2 = \bar{\eta}_i^2 = 0. \quad (\text{B.2})$$

Ein Element der Graßmann-Algebra wird im Allgemeinen mithilfe einer Potenzreihe in η_i dargestellt¹

$$f(\eta) = f_0 + \sum_i f_i \eta_i + \sum_{i \neq j} f_{ij} \eta_i \eta_j + \dots + f_{12\dots n} \eta_1 \eta_2 \dots \eta_n. \quad (\text{B.3})$$

Aufgrund (B.2) hat die Potenzreihe jedoch nur eine endliche Anzahl an Termen [24].

B.2. Integration über Graßmann-Variablen

In diesem Teilabschnitt möchten wir die Regeln zur Auswertung von graßmannwertigen Integralen in der allgemeinen Form

$$\int \mathcal{D}\eta f(\eta)$$

diskutieren, wobei $\mathcal{D}\eta = \prod_{i=1}^n d\eta_i$ und $f(\eta)$ die in (B.3) definierte Funktion bezeichnet. Da wegen (B.2) jedes η_i nur einmal in jedem Term von (B.3) auftaucht, reichen die folgenden Regeln zur Auswertung des obigen Integrals aus

$$\int d\eta_i (a + b\eta_i) = b, \quad a, b \in \mathbb{C}.$$

¹Die Menge $\{\eta_i, \bar{\eta}_i\}_{i=1}^n$ kann man freilich durch $\{\eta_i\}_{i=1}^{2n}$ ersetzen, indem man η_{n+i} mit $\bar{\eta}_i$ gleichsetzt [24]. Obwohl wir in der vorliegenden Arbeit die Schreibweise mit dem Überstrich verwenden, ist es an manchen Stellen vorteilhaft, der Überschaubarkeit halber die Notation mit $2n$ Graßmann-Variablen zu gebrauchen.

Des Weiteren muss man darauf achten, dass die Integrationsmaße $\{d\eta_i\}_{i=1}^n$ miteinander und mit den Graßmann-Variablen $\{\eta_i\}_{i=1}^n$ antikommutieren [16, 24]

$$\{d\eta_i, d\eta_j\} = \{\eta_i, d\eta_j\} = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Da die Wirkung vieler aus physikalischer Sicht relevanter Systeme eine bilineare Form besitzt [16], wenden wir uns an der Stelle als erstes Beispiel der Auswertung des Integrals

$$I[A] = \int \mathcal{D}\bar{\eta}\mathcal{D}\eta e^{-\sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j}$$

zu². Im ersten Schritt verwenden wir die Tatsache, dass die Terme in der Summe vertauschbar sind und drücken die Summation über i durch eine Produkt aus

$$\begin{aligned} e^{-\sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j} &= \prod_{i=1}^n e^{-\bar{\eta}_i \sum_{j=1}^n A_{ij} \eta_j} \\ &= \prod_{i=1}^n \left(1 - \bar{\eta}_i \sum_{j=1}^n A_{ij} \eta_j \right). \end{aligned}$$

Bei der Entwicklung der Exponentialfunktion fallen alle Terme zweiter und höherer Ordnung aufgrund (B.2) weg. Zieht man die Graßmann-Integrationsregeln in Betracht, sind nur die Terme zur Auswertung des Integrals relevant, die das Produkt aller Graßmann-Variablen beinhalten

$$K(\bar{\eta}, \eta) = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} \eta_{j_1} \bar{\eta}_1 \eta_{j_2} \bar{\eta}_2 \dots \eta_{j_n} \bar{\eta}_n A_{1j_1} A_{2j_2} \dots A_{nj_n}.$$

Die Vertauschung jedes Paares $\eta_i \bar{\eta}_j$ in der obigen Terme ist antisymmetrisch. Um alle möglichen Permutationen zu berücksichtigen führen wir das Levi-Civita-Symbol in n Dimensionen ein und schreiben

$$K(\bar{\eta}, \eta) = \eta_{j_1} \bar{\eta}_1 \eta_{j_2} \bar{\eta}_2 \dots \eta_{j_n} \bar{\eta}_n \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} \epsilon_{j_1, j_2, \dots, j_n} A_{1j_1} A_{2j_2} \dots A_{nj_n}. \quad (\text{B.4})$$

Die Summation in (B.4) ist die Determinante der Matrix A . Also,

$$I[A] = \left[\prod_{i=1}^n \int d\bar{\eta}_i d\eta_i \bar{\eta}_i \eta_i \right] \det A = \det A.$$

Als zweites Beispiel möchten wir auf die Berechnung des folgenden erzeugenden Funktionales eingehen

$$Z[\rho, \bar{\rho}] = \int \mathcal{D}\bar{\eta}\mathcal{D}\eta e^{-\sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j + \sum_{i=1}^n (\bar{\eta}_i \rho_i + \bar{\rho}_i \eta_i)}, \quad (\text{B.5})$$

wobei $\{\eta_i, \bar{\eta}_i, \rho_i, \bar{\rho}_i\}$ die Erzeuger der Graßmann-Algebra sind. Dabei sind $\{\rho_i, \bar{\rho}_i\}$ graßmannwertige Quellen [16]. Nach der Variablenänderung

$$\begin{aligned} \eta'_i &= \eta_i - \sum_k A_{ik}^{-1} \rho_k, \\ \bar{\eta}'_i &= \bar{\eta}_i - \sum_k A_{ik}^{-1} \bar{\rho}_k, \end{aligned}$$

mit A^{-1} die Inverse der Matrix A kann man (B.5) in die folgende einfache Form bringen

$$Z[\rho, \bar{\rho}] = \det A e^{\sum_{i,j=1}^n \bar{\rho}_i A_{ij}^{-1} \rho_j}.$$

Man beachte, dass $Z[\rho, \bar{\rho}]$ im bosonischen Fall proportional zu $(\det A)^{-1/2}$ ist [24].

²Unsere Rechnungen in diesem und im nächsten Teilabschnitt beruhen zum größten Teil auf den Lösungswegen, die in dem Buch von H. Rothe [24] diskutiert werden.

B.3. Partielle Ableitung nach Graßmann-Variablen

Zur Berechnung der fermionischen Korrelationsfunktionen in der Quantenfeldtheorie muss man Integrale in der Form von

$$I_{i_1 \dots i_l j_1 \dots j_l}[A] = \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta \bar{\eta}_{i_1} \dots \bar{\eta}_{i_l} \eta_{j_1} \dots \eta_{j_l} e^{-\sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j} \quad (\text{B.6})$$

auswerten. Dies ist anhand mehrfacher Ableitung des erzeugenden Funktionales (B.5) von links und rechts zu realisieren

$$I_{i_1 \dots i_l j_1 \dots j_l}[A] = \left[\frac{\partial}{\partial \rho_{i_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \rho_{i_l}} Z[\rho, \bar{\rho}] \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \bar{\rho}_{j_1}} \dots \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \bar{\rho}_{j_l}} \right]_{\rho=\bar{\rho}=0}.$$

Aus diesem Grunde ist eine Diskussion der partiellen Ableitung nach Graßmann-Variablen an dieser Stelle zweckmäßig. Dazu betrachten wir eine Funktion $f(\eta)$. Um die Ableitung von $f(\eta)$ nach η_i zu bestimmen, berücksichtigen wir die folgenden Regeln [24]:

- (a) Hängt $f(\eta)$ nicht von η_i ab, dann ist $\partial_{\eta_i} f(\eta) = 0$.
- (b) Um die linke Ableitung zu berechnen, muss man die Variable η_i durch entsprechende Permutationen laut den Antikommutatorrelationen nach links bringen und dann die folgende Regel verwenden

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_i = 1.$$

- (c) Die rechte Ableitung ist eine logische Erweiterung der linken Ableitung. Man bringe η_i durch Vertauschungen nach rechts und verwende die Regel

$$\eta_i \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \eta_i} = 1.$$

Die obigen Betrachtungen ermöglichen uns, die uns interessierenden n-Punkt-Funktionen

$$\langle \bar{\eta}_{i_1} \dots \bar{\eta}_{i_m} \eta_{j_1} \dots \eta_{j_n} \rangle \quad (\text{B.7})$$

zu berechnen. Die Definition der Graßmann-Integration erfordert, dass diese Konstrukte für $m \neq n$ verschwinden [16]. Ein wichtiges Beispiel, dem wir in dieser Arbeit oft begegnen, ist die 2-Punkt-Funktion

$$\langle \bar{\eta}_i \eta_j \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta \bar{\eta}_i \eta_j e^{-\sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j} = A_{ij}^{-1},$$

wobei

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta e^{-\sum_{i,j=1}^n \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j}$$

als Zustandssumme des physikalischen Systems angenommen wird. Für eine ausführliche Behandlung des allgemeinen Falls (B.7) kann der Leser im Buch „Lattice Gauge Theories“ [24] von H. Rothe nachschlagen.

Literatur

- [1] H. Arendt, P.R. Baehr und P. Baehr. *The Portable Hannah Arendt*. Penguin classics. Penguin Books, 2003. ISBN: 9780142437568.
- [2] C. Rapp. *Vorsokratiker*. Beck Reihe. Beck, 2007. ISBN: 9783406547614.
- [3] O. Höffe. *Kleine Geschichte der Philosophie*. Beck Reihe. Beck, 2008. ISBN: 9783406573859.
- [4] L. Janssen. „Critical Phenomena in (2+1)-dimensional Relativistic Fermion Systems“. Diss. Friedrich-Schiller-Universität Jena, 2012.
- [5] H. W. Robinson. „Denis Papin (1647-1712)“. In: *Notes Rec. R. Soc.* 5.1 (Okt. 1947), S. 47–50. ISSN: 0035-9149. DOI: [10.1098/rsnr.1947.0007](https://doi.org/10.1098/rsnr.1947.0007).
- [6] Ch. Cagniard de la Tour. „On the Combined Action of Heat and Pressure on Water, Sulphuric Æther, and Rectified Oil of Petroleum“. In: *Philos. Mag.* 61 (1823), S. 58–61.
- [7] B. Berche, M. Henkel und R. Kenna. „Critical Phenomena: 150 Years Since Cagniard de la Tour“. In: *Rev. Bras. Ens. Fis.* 31 (2009) 2602 ; *J. Phys. Studies* 13 (2009) 3201 (2009). eprint: [arXiv:0905.1886](https://arxiv.org/abs/0905.1886).
- [8] Th. Andrews. „The Bakerian Lecture: On the Continuity of the Gaseous and Liquid States of Matter“. In: *Phil. Trans.* 159 (1869), S. 575–590. ISSN: 02610523. URL: <http://www.jstor.org/stable/109009>.
- [9] L. E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. Wiley, 2009. ISBN: 9783527407828.
- [10] L.D. Landau, E.M. Lifschitz und Pitajewski L.P. *Statistische Physik*. Lehrbuch der theoretischen Physik. Akademie-Verlag, 1987. ISBN: 3055000633.
- [11] G. Jaeger. „The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution“. In: *Arch. Hist. Exact Sci.* 53.1 (1998), S. 51–81. ISSN: 0003-9519. DOI: [10.1007/s004070050021](https://doi.org/10.1007/s004070050021).
- [12] E. A. Guggenheim. „The Principle of Corresponding States“. In: *J. Chem. Phys.* 13.7 (1945), S. 253–261. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1724033>.
- [13] P. Kapitza. „Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point“. In: *Nature* 141 (1938), S. 74–74. DOI: [10.1038/141074a0](https://doi.org/10.1038/141074a0).
- [14] P. Ehrenfest. „Phasenumwandlungen im ueblichen und erweiterten Sinn, classifiziert nach den entsprechenden Singularitaeten des thermodynamischen Potentials“. In: *Proceedings Royal Acad. Amsterdam* 36 (Supplement 75b 1933), S. 153–157.
- [15] Lars Onsager. „Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition“. In: *Phys. Rev.* 65 (3-4 1944), S. 117–149. DOI: [10.1103/PhysRev.65.117](https://doi.org/10.1103/PhysRev.65.117).
- [16] A. Wipf. *A Statistical Approach to Quantum Field Theory: An Introduction*. Lecture Notes in Physics. Springer, 2013. ISBN: 9783642331046.
- [17] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 1987. ISBN: 9780471815181.
- [18] M. E. Fisher. „The Theory of Equilibrium Critical Phenomena“. In: *Rep. Prog. Phys.* 30.2 (1967), S. 615–730. ISSN: 00344885. DOI: [10.1088/0034-4885/30/2/306](https://doi.org/10.1088/0034-4885/30/2/306).

- [19] J. Goldstone. „Field Theories with Superconductor Solutions“. In: *Nuovo Cimento* 19.1 (1961), S. 154–164. ISSN: 0029-6341. DOI: [10.1007/BF02812722](https://doi.org/10.1007/BF02812722).
- [20] J. Goldstone, A. Salam und S. Weinberg. „Broken Symmetries“. In: *Phys. Rev.* 127.3 (1962), S. 965–970. ISSN: 0031-899X. DOI: [10.1103/PhysRev.127.965](https://doi.org/10.1103/PhysRev.127.965).
- [21] M.E. Peskin und D.V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 1995. ISBN: 9780201503975.
- [22] R. Feynman. „Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics“. In: *Rev. Mod. Phys.* 20.2 (1948), S. 367–387. ISSN: 0034-6861. DOI: [10.1103/RevModPhys.20.367](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.20.367).
- [23] M. Creutz und B. Freedman. „A Statistical Approach to Quantum Mechanics“. In: *Ann. Phys.* 132.2 (1981), S. 427–462. ISSN: 00034916. DOI: [10.1016/0003-4916\(81\)90074-9](https://doi.org/10.1016/0003-4916(81)90074-9).
- [24] H.-J. Rothe. *Lattice Gauge Theories: An Introduction*. Lecture Notes in Physics. World Scientific, 2005. ISBN: 9789812560629.
- [25] S. Drell, M. Weinstein und Sh. Yankielowicz. „Strong-Coupling Field Theory. I. Variational Approach to ϕ^4 Theory“. In: *Phys. Rev. D* 14.2 (1976), S. 487–516. ISSN: 0556-2821. DOI: [10.1103/PhysRevD.14.487](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.14.487).
- [26] U.-J. Wiese. *An Introduction to Lattice Field Theory*. 2009. URL: <http://inspirehep.net/record/946884/files/>.
- [27] S. Drell, M. Weinstein und Sh. Yankielowicz. „Strong-Coupling Field Theories. II. Fermions and Gauge Fields on a Lattice“. In: *Phys. Rev. D* 14.6 (1976), S. 1627–1647. ISSN: 0556-2821. DOI: [10.1103/PhysRevD.14.1627](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.14.1627).
- [28] K. G. Wilson. „Confinement of Quarks“. In: *Phys. Rev. D* 10.8 (1974), S. 2445–2459. ISSN: 0556-2821. DOI: [10.1103/PhysRevD.10.2445](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.10.2445).
- [29] J. Kogut und L. Susskind. „Hamiltonian Formulation of Wilson’s Lattice Gauge Theories“. In: *Phys. Rev. D* 11.2 (1975), S. 395–408. ISSN: 0556-2821. DOI: [10.1103/PhysRevD.11.395](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.11.395).
- [30] A. Kirchberg, J.D. Länge und A. Wipf. „From the Dirac Operator to Wess–Zumino Models on Spatial Lattices“. In: *Ann. Phys.* 316.2 (2005), S. 357–392. ISSN: 0003-4916. DOI: [10.1016/j.aop.2004.09.002](https://doi.org/10.1016/j.aop.2004.09.002).
- [31] H. G. Katzgraber. *Introduction to Monte Carlo Methods*. 2009. eprint: [arXiv:0905.1629](https://arxiv.org/abs/0905.1629).
- [32] S. Duane u. a. „Hybrid Monte Carlo“. In: *Phys. Lett. B* 195.2 (1987), S. 216–222. ISSN: 03702693. DOI: [10.1016/0370-2693\(87\)91197-X](https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)91197-X).
- [33] N. Metropolis u. a. „Equation of State Calculations by Fast Computing Machines“. In: *J. Chem. Phys.* 21.6 (1953), S. 1087–1092. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1699114>.
- [34] Kari Rummukainen. *Lecture Notes: Monte Carlo Simulation Methods*. URL: http://www.helsinki.fi/~rummukai/lectures/montecarlo_oulu/.
- [35] M. A. Clark. „The Rational Hybrid Monte Carlo Algorithm“. In: (2006), S. 15. eprint: [hep-lat/0610048](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0610048).
- [36] B.-H. Wellegehausen. „Phase Diagrams of Exceptional and Supersymmetric Lattice Gauge Theories“. Diss. Friedrich-Schiller-Universität Jena, 2012.
- [37] F. Fucito u. a. „A Proposal for Monte Carlo Simulations of Fermionic Systems“. In: *Nucl. Phys. B* 180.3 (1981), S. 369–377. ISSN: 05503213. DOI: [10.1016/0550-3213\(81\)90055-9](https://doi.org/10.1016/0550-3213(81)90055-9).
- [38] I. Horváth, A. D. Kennedy und S. Sint. „A New Exact Method for Dynamical Fermion Computations with Non-Local Actions“. In: *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* 73.1–3 (1999), S. 834–836. ISSN: 0920-5632. DOI: [10.1016/S0920-5632\(99\)85217-7](https://doi.org/10.1016/S0920-5632(99)85217-7).

- [39] M. A. Clark und A. D. Kennedy. „The {RHMC} Algorithm for 2 Flavours of Dynamical Staggered Fermions“. In: *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* 129–130.0 (2004). Lattice 2003, S. 850–852. ISSN: 0920-5632. DOI: [10.1016/S0920-5632\(03\)02732-4](https://doi.org/10.1016/S0920-5632(03)02732-4).
- [40] B. A. Berg. *Introduction to Markov Chain Monte Carlo Simulations and their Statistical Analysis*. In Markov Chain Monte Carlo, W.S. Kendall et al. Editors, Lecture Notes Series, Institute for Mathematical Sciences, National University of Singapore, Vol.7, p.1 ff., World Scientific, 2005. 2004. eprint: [cond-mat/0410490](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0410490).
- [41] V. Koch. „Aspects of Chiral Symmetry“. In: *Int. J. Mod. Phys. E* 06.02 (1997), S. 203–249. ISSN: 0218-3013. DOI: [10.1142/S0218301397000147](https://doi.org/10.1142/S0218301397000147). eprint: [nucl-th/9706075v2](https://arxiv.org/abs/nucl-th/9706075v2).
- [42] Shailesh Chandrasekharan und Uwe-Jens Wiese. „An Introduction to Chiral Symmetry on the Lattice“. In: *Prog. Part. Nucl. Phys.* 53.2 (2004), S. 373–418. ISSN: 01466410. DOI: [10.1016/j.pnpnp.2004.05.003](https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2004.05.003).
- [43] Th. Streuer. „Simulation der Quantenchromodynamik mit Overlap-Fermionen“. Diss. Freie Universität Berlin, 2006. URL: <http://www.diss.fu-berlin.de/2006/395/>.
- [44] M. Lüscher. „Exact Chiral Symmetry on the Lattice and the Ginsparg-Wilson Relation“. In: *Phys. Lett. B* 428.3-4 (1998), S. 342–345. ISSN: 03702693. DOI: [10.1016/S0370-2693\(98\)00423-7](https://doi.org/10.1016/S0370-2693(98)00423-7).
- [45] J. Braun. *Fermion Interactions and Universal Behavior in Strongly Interacting Theories*. 2011. eprint: [1108.4449](https://arxiv.org/abs/1108.4449).
- [46] S. Hands. *Fixed Point Four-Fermi Theories*. 1997. eprint: [hep-lat/9706018](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9706018).
- [47] E. Fermi. „Tentativo di una Teoria Dei Raggi β “. In: *Nuovo Cimento* 11.1 (1934), S. 1–19. ISSN: 0029-6341. DOI: [10.1007/BF02959820](https://doi.org/10.1007/BF02959820).
- [48] F. L. Wilson. „Fermi’s Theory of Beta Decay“. In: *Am. J. Phys.* 36.12 (1968), S. 1150–1160. DOI: [10.1119/1.1974382](https://doi.org/10.1119/1.1974382).
- [49] E. Fermi. „Versuch einer Theorie der β -Strahlen. I“. German. In: *Z. Physik* 88.3-4 (1934), S. 161–177. ISSN: 0044-3328. DOI: [10.1007/BF01351864](https://doi.org/10.1007/BF01351864).
- [50] Y. Nambu und G. Jona-Lasinio. „Dynamical Model of Elementary Particles Based on an Analogy with Superconductivity. I“. In: *Phys. Rev.* 122 (1 1961), S. 345–358. DOI: [10.1103/PhysRev.122.345](https://doi.org/10.1103/PhysRev.122.345).
- [51] Y. Nambu und G. Jona-Lasinio. „Dynamical Model of Elementary Particles Based on an Analogy with Superconductivity. II“. In: *Phys. Rev.* 124 (1 1961), S. 246–254. DOI: [10.1103/PhysRev.124.246](https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.246).
- [52] D. J. Gross und A. Neveu. „Dynamical Symmetry Breaking in Asymptotically Free Field Theories“. In: *Phys. Rev. D* 10 (10 1974), S. 3235–3253. DOI: [10.1103/PhysRevD.10.3235](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.10.3235).
- [53] W. E. Thirring. „A Soluble Relativistic Field Theory“. In: *Ann. Phys.* 3.1 (1958), S. 91–112. ISSN: 00034916. DOI: [10.1016/0003-4916\(58\)90015-0](https://doi.org/10.1016/0003-4916(58)90015-0).
- [54] L. Del Debbio und S. Hands. „Monte Carlo Simulation of the Three Dimensional Thirring Model“. In: *Phys. Lett. B* 373.1-3 (1996), S. 171–177. ISSN: 03702693. DOI: [10.1016/0370-2693\(96\)00137-2](https://doi.org/10.1016/0370-2693(96)00137-2).
- [55] Simon Hands. „Monte Carlo Study of the 3D Thirring Model“. In: (Feb. 1997), S. 7. arXiv:[9702003](https://arxiv.org/abs/9702003) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)]. URL: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/9702003>.
- [56] S. Christofi, S. Hands und C. Strouthos. „Critical Flavor Number in the Three Dimensional Thirring Model“. In: *Phys. Rev. D* 75.10 (2007), S. 101701. ISSN: 1550-7998. DOI: [10.1103/PhysRevD.75.101701](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.75.101701).
- [57] J. Hubbard. „Calculation of Partition Functions“. In: *Phys. Rev. Lett.* 3 (2 1959), S. 77–78. DOI: [10.1103/PhysRevLett.3.77](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.3.77).

- [58] R. L. Stratonovich. „On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions“. In: *Sov. Phys. Dokl.* 2 (1957), S. 416.
- [59] Sh. Kun und Q. Zhongping. „Chiral Ward-Takahashi identities and mass spectra in (2+1)-dimensional chiral Gross-Neveu model“. In: *Phys. Rev. D* 45 (10 1992), S. 3877–3879. DOI: [10.1103/PhysRevD.45.3877](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.45.3877).
- [60] S. Christofi, S. Hands und C. Strouthos. *Phase Diagram of the Three Dimensional Thirring Model - A Monte Carlo Study*. 2007. eprint: [hep-lat/0703016](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0703016).
- [61] L. Janssen und H. Gies. „Critical Behavior of the (2+1)-Dimensional Thirring Model“. In: *Phys. Rev. D* 86.10 (2012), S. 105007. ISSN: 1550-7998. DOI: [10.1103/PhysRevD.86.105007](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.86.105007).
- [62] B. de Wit und E. Laenen. *Skript zur Vorlesung Field Theory in Particle Physics*. 2010. URL: <http://www.nikhef.nl/~t45/ftip/AppendixE.pdf>.
- [63] M. Mühlleitner. *Skript zur Vorlesung Theoretische Teilchenphysik II*. 2012. URL: http://www.itp.kit.edu/~rauch/Teaching/WS1112_TTP2/ttp2.pdf.
- [64] P. Maier. *Skript zur Vorlesung Darstellungstheorie endlicher Gruppen*. 2002. URL: http://www.mathematik.tu-darmstadt.de/Math-Net/Lehrveranstaltungen/Lehrmaterial/WS2001-2002/Darstellungstheorie_endlicher_Groupen/darstheo.pdf.
- [65] F. Wegner. *Grassmann-Variable*. 1998. URL: <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~wegner/grassmann.ps>.

Danksagung

Der erste Dank geht an Herrn Prof. Dr. Andreas Wipf, der mir das Thema der Arbeit vorschlug und es mir ermöglichte, die Diplomarbeit in der Arbeitsgruppe anzufertigen. Die in seinen Vorlesungen und Seminaren erlebte Begeisterung für die Quantenfeldtheorie und statistische Physik waren der Hauptgrund dafür, dass ich mich für dieses Thema entschieden habe.

Herr Prof. Dr. Holger Gies hat mir die Grundlagen der Quantenfeldtheorie beigebracht. Ihm bin ich dafür sowie für viele anregende Diskussionen für immer dankbar.

Diese Arbeit konnte ich nur mit der hervorragenden und sehr freundlichen Unterstützung meiner beiden Betreuer, Herrn Dr. Björn Welleghauesen und Herrn Dipl.-Phys. Daniel Körner, anfertigen. Von ihnen habe ich vieles gelernt und möchte mich dafür bei beiden recht herzlich bedanken.

Meiner netten Bürokollegin Julia Borchardt sowie Alexander Blinne möchte ich für das Korrekturlesen der Arbeit danken. Ich danke auch Frau Sabine Irmer vom Universitätsrechenzentrum sowie David Schinkel vom TPI, die mir bei technischen Problemen immer zur Seite standen.

Schließlich danke ich meinen Eltern für alles was sie für mich getan haben. Ihnen bin ich meine Existenz und alles, was ich bisher erreicht habe, schuldig.

Selbstständigkeitserklärung

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe.

Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände die vorliegende Diplomarbeit für die öffentliche Benutzung im Universitätsarchiv zur Verfügung zu stellen.

Jena, den