Numerische Untersuchung des elektroschwachen Phasenübergangs im SU(2)-Higgs-Modell

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Joachim Hein
aus Rahden

Hamburg
1996

Gutachter der Dissertation:		PrivDoz. Dr. I. Montvay Prof. Dr. G. Mack
Gutachter der Disputation:		PrivDoz. Dr. K. Jansen Prof. Dr. G. Mack
Datum der Disputation	:	12.07.1996
Sprecher des Fachbereichs Physik und Vorsitzender des Promotionsausschusses	:	Prof. Dr. B. Kramer

Zusammenfassung

Der elektroschwache Phasenübergang bei endlicher Temperatur wird in numerischen Simulationen des SU(2)-Higgs-Modells auf vierdimensionalen Gittern untersucht, und die Möglichkeit der elektroschwachen Baryogenese wird diskutiert. Die Methode zur Bestimmung der Lage des Phasenübergangs im Raum der nackten Parameter wird detailliert beschrieben, wobei auch der Einfluß des Simulationsvolumens auf die kritischen Parameter studiert wird. Aus den renormierten Massen und Kopplungen bei verschiedenen Werten der Gitterkonstanten wird der Kontinuumslimes der kritischen Temperatur bestimmt, und die Unterkühlung bis zum Eintritt des Phasenübergangs wird aus der Oberflächenspannung und der latenten Wärme abgeschätzt. Einen weiteren Schwerpunkt bilden die Messungen der Abweichung des elektroschwachen Plasmas von einem strahlungsdominierten Plasma und des Vakuumerwartungswertes des Skalarfeldes bei verschiedenen Temperaturen. Abschließend werden die Resultate der resummierten Störungstheorie und die Simulationsergebnisse dreidimensionaler effektiver Theorien mit den Resultaten der vorliegenden Arbeit verglichen.

Abstract

The electroweak phase transition at finite temperature is investigated in numerical simulations of the SU(2)-Higgs-model on four-dimensional lattices and the possibility of electroweak baryogenesis is discussed. The method applied for the determination of the critical bare couplings is described in detail, including an analysis of the finite size scaling. The continuum limit of the critical temperature is determined from the renormalised masses and couplings at different values of the lattice spacing. The interface tension and the latent heat provide an estimate of the supercooling of the high temperature phase. Furtheron the deviation of the electroweak plasma from a radiation dominated plasma as well as the vacuum expectation value of the scalar field are measured as functions of the temperature. Finally the results of resummed perturbation theory and the simulations in three-dimensional reduced theories are compared to the outcome of the present analysis.

Meinen Eltern

Cäcilia & Johannes Hein

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **5**

1.1 Motivation 5

1.2 Aufbau und Gliederung 7

2 Das SU(2)-Higgs-Modell **8**

2.1 Gitterwirkung 8

3 Simulationstechniken **10**

3.1 Computer und Datenorganisation 10

3.2 Algorithmen 11

3.3 Autokorrelationszeit 13

3.4 Fitkurven 15

3.5 Gewichtung und Taylorprojektion 16

4 Renormierungsgruppenfluß und Phasenübergang **19**

4.1 Kurven konstanter Physik 19

4.2 Bestimmung der Lage des Phasenüberganges 20

4.3 Hysterese 22

4.4 2-Kopplungs-Methode 22

4.5 Simulation mit beschränktem Ordnungsparameter 24

4.6 Phasenübergang im endlichen Volumen 27

5 Renormierte Massen und Kopplungen **30**

5.1 Massen bei $T = 0$ 30

5.2 Renormierte Eichkopplung 31

5.3 Kritische Temperatur 34

5.4 Spektrum in der Nähe des Phasenübergangs 35

6 Oberflächenspannung **39**

6.1 Kondensationskeime 39

6.2 Oberflächenspannung und 2-Kopplungs-Methode 40

6.3 Vakuumtunneln und Histogramm 47

7 Latente Wärme **49**

7.1 Messung der latenten Wärme 49

7.2 Clausius-Clapeyron-Gleichung 51

8 Thermodynamik des SU(2)-Higgs-Modells **53**

8.1 Energiedichte und Druck 53

8.2 Vakuumerwartungswert 56

9 Diskussion **59**

9.1 Zusammenfassung 59

9.2 Eigenschaften des Phasenübergangs 60

9.3 Vergleich der Zugänge 61

9.4 Sphaleronenergie 62

Danksagung **64**

A Tabellen **65**

Literaturverzeichnis **72**

Tu was du willst
Michael Ende

Kapitel 1

Einleitung

Die Symmetrie des Standardmodells der Elementarteilchenphysik wird bei großen Temperaturen wiederhergestellt, denn oberhalb der kritischen Temperatur T_c verschwindet der Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes, wie 1972 von Kirzhnitz und Linde gezeigt wurde [1]. Von Kuzmin, Rubakov und Shaposhnikov wurde 1985 vorgeschlagen, die Entstehung der Baryonenasymmetrie des Universums durch CP-verletzende Prozesse während des elektroschwachen Phasenübergangs zu erklären [2]. Aus diesem Grund ist in der jüngsten Zeit der Untersuchung des elektroschwachen Phasenübergangs großes Interesse entgegengebracht worden, wie im folgenden erläutert wird.

1.1 Motivation

Zur Erzeugung einer Baryonenasymmetrie durch physikalische Prozesse wurden von Sakharov drei notwendige Bedingungen formuliert [3]:

- Baryonenzahlverletzung
- C- und CP-Verletzung
- Thermisches Ungleichgewicht

Die erste Bedingung ergibt sich in der elektroschwachen Theorie aus der Fermionenzahlverletzung durch die *ABJ-Anomalie* [4], die zu einer Verknüpfung der Fermionenzahl mit der *topologischen Ladung* nichtabelscher Eichtheorien führt. Zur Änderung der Fermionenzahl sind deshalb Übergänge zwischen Vakua mit verschiedenen topologischen Ladungen notwendig. Die Baryonenzahl B und die Leptonenzahl L werden dabei simultan um den gleichen Betrag verändert, die Differenz $(B-L)$ bleibt in diesen Prozessen konstant.

Die Übergangsrate zwischen topologisch verschiedenen Vakua ist bei der Temperatur $T=0$ extrem gering, und die Fermionenzahl bleibt erhalten [5]. Die Energiebarriere zwischen topologisch verschiedenen Vakua kann aber bei hinreichend großer Temperatur durch die thermische Energie überwunden werden. Die Höhe dieser Barriere ist mit dem Vakuumerwartungswert v des Skalarfeldes verknüpft und ergibt sich aus klassischen Feldgleichungen zu [6]

$$E_{\mathrm{sph}} = \frac{4\pi\, v}{g} \cdot B\left(\lambda/g^2\right) . \qquad (1.1)$$

Die zugehörige Sattelpunktkonfiguration wird *Sphaleron* genannt. Für die Funktion B ergeben sich Werte von 1.5 bis 2.7, wenn ihr Argument von 0 bis ∞ variiert.

Im Standardmodell wird die benötigte C- und CP-Verletzung durch den chiralen Charakter der elektroschwachen Wechselwirkung und die CP-verletzende Phase in der *Cabibbo-Kobayashi-Maskawa-Mischungsmatrix* gegeben, so daß auch Sakharovs zweite Bedingung erfüllt ist.

Im Fall eines Phasenübergangs erster Ordnung unterkühlt sich das System in der Hochtemperaturphase bevor der Übergang eintritt. In der unterkühlten, metastabilen Phase bilden sich Blasen der Tieftemperaturphase, und die freiwerdende latente Wärme führt zu einer Wiederaufheizung in der Umgebung der Kondensationskeime, so daß sich die

benötigte Abweichung vom thermischen Gleichgewicht ergibt.

Auf dieser Basis wird in [2, 7] die Hypothese der *elektroschwachen Baryogenese* aufgestellt. Die Autoren argumentieren, daß sich die fermionzahlverletzenden Prozesse in der symmetrischen Phase im thermischen Gleichgewicht befinden. Demnach ist jede zuvor erzeugte Baryonenasymmetrie beim Erreichen des elektroschwachen Phasenübergangs bereits ausgewaschen, sofern sie nicht auf eine $(B-L)$-Asymmetrie zurückzuführen ist. Damit eine während des Phasenübergangs erzeugte Baryonenzahl anschließend nicht erneut ausgewaschen werden kann, müssen die Sphaleronübergänge in der Higgsphase stark unterdrückt sein. Aus dieser Forderung ergibt sich durch Vergleich der Sphaleronrate mit der Ausdehnungsrate des Universums die Bedingung [7]

$$\frac{E_{\mathrm{sph}}(T_r)}{T_r} \geq 45\,. \tag{1.2}$$

Mit T_r wird hier die Temperatur nach Abschluß des Phasenübergangs bezeichnet, die deutlich geringer als die kritische Temperatur T_c sein kann [8]. Aufgrund der Verknüpfung der Sphaleronenergie mit dem Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes läßt sich diese Bedingung nur durch einen Phasenübergang 1. Ordnung mit großer Unstetigkeit erfüllen.

In der störungstheoretischen Untersuchung dieser Fragestellungen führt das Verschwinden des Vakuumerwartungswertes des Skalarfeldes in der symmetrischen Phase zum Auftreten infrarotdivergenter Schleifenintegrale. Durch *Resummation* lassen sich Teile dieser Divergenzen in der störungstheoretischen Entwicklung des effektiven Potentials beheben [9, 10, 11]. Dabei wird eine Hochtemperaturentwicklung der Selbstenergiediagramme durchgeführt, der führende Term der Entwicklung wird als *thermische Masse* zur Baumgraphenmasse des Propagators addiert. In den Referenzen [12, 13] wird das effektive Potential bis zur Ordnung $\mathcal{O}(g^4, \lambda^2)$ bestimmt.

Die erwähnten Infrarotdivergenzen in den Schleifenintegralen entstehen aus den statischen *Matsubaramoden* der Felder. Aufgrund der antiperiodischen Randbedingungen der fermionischen Felder treten statische Moden nur in den bosonischen Feldern (Skalar- und Eichfelder) auf. In den letzten Jahren wurde von verschiedenen Autoren der Ansatz verfolgt, eine effektive dreidimensionale Theorie zur Beschreibung des Phasenübergangs durch *Ausintegrieren* der nichtstatischen Moden zu konstruieren. Eine exakte Behandlung führt allerdings auf nichtlokale Wechselwirkungen in der effektiven Theorie [14, 15]. Zur Vermeidung der nichtlokaler Terme wurde in [16] vorgeschlagen, durch den Vergleich der Greens-Funktionen der vollen vierdimensionalen und der effektiven dreidimensionalen Theorie im störungstheoretischen Bereich unter Vernachlässigung höherdimensionaler Operatoren eine superrenormierbare effektive Theorie zu konstruieren. Dazu geben die Autoren zwei verschiedene Stufen der Reduktion in Abhängigkeit vom betrachteten Impulsbereich an: Für $k \ll T$ müssen die Zeitkomponenten der Eichfelder A_0 in der effektiven Theorie belassen werden, für $k \ll gT$ können auch diese Moden ausintegriert werden, und es ergibt sich ein SU(2)-Higgs-Modell in drei Dimensionen. Auf diese Weise wird versucht, aus Ergebnissen für das SU(2)-Higgs-Modell in drei Dimensionen Rückschlüsse auf eine Vielzahl von Theorien in vier Dimensionen, wie zum Beispiel das SU(2)-Higgs-Modell, das Standardmodell und Erweiterungen des Standardmodells, zu ziehen. Es ist anzumerken, daß in [16] keine Abschätzung des Einflusses der vernachlässigten Operatoren und der nichtperturbativen Effekte beim Übergang von der vier- zur dreidimensionalen Theorie angegeben werden kann.

Numerische Gittersimulationen bieten eine Möglichkeit der nichtperturbativen Beschreibung der Eigenschaften des elektroschwachen Phasenübergangs einschließlich der statischen Matsubaramoden. Zu diesem Zweck sind in den letzten Jahren von verschieden Gruppen umfangreiche Simulationen sowohl in vierdimensionalen [17]-[22] als auch in dreidimensionalen, reduzierten Theorien [23]-[28] durchgeführt worden.

Ein Überblick über die Ergebnisse der durchgeführten numerischen Gitteruntersuchungen ist in dem Konferenzbeitrag von Karl Jansen [29] zu fin-

den. In [30] wird die Fermionenzahlverletzung in elektroschwachen Prozessen allgemein diskutiert.

1.2 Aufbau und Gliederung

In der vorliegenden Arbeit wird das SU(2)-Higgs-Modell in vier Dimensionen in numerischen Gittersimulationen studiert. Dies ist eine Untersuchung aus *ersten Prinzipien*, die geeignet ist, systematische Fehler der resummierten Störungstheorie und der dimensionalen Reduktion aufzuzeigen. Der physikalische Schwerpunkt der Untersuchung liegt auf den Eigenschaften des Phasenübergangs. Darüber hinaus werden aber auch Eigenschaften des Plasmas abseits der kritischen Temperatur diskutiert.

Diese Arbeit ist Teil eines mehrjährigen Projekts zur numerischen Untersuchung des elektroschwachen Phasenübergangs. In diesem Rahmen wurden drei Meßreihen für verschiedene Werte der physikalischen Higgsmasse durchgeführt, die im weiteren mit **l**, **m** und **h** bezeichnet werden. Die Indizes beziehen sich auf die Masse des Higgsbosons: „low“, „medium“ und „high“. Aus den Simulationsergebnissen ergibt sich $M_H \approx 17$ GeV, 34 GeV bzw. 48 GeV. Higgsmassen $M_H < 65.2$ GeV sind durch die LEP-Experimente ausgeschlossen [31], somit ist diese Untersuchung von theoretischem Interesse. Die Ergebnisse der **l**- und **h**-Meßreihe sind zum größten Teil in den Referenzen [18, 19] veröffentlicht, die vorliegende Arbeit konzentriert sich hauptsächlich auf die **m**-Reihe.

Das 2. Kapitel dient der Einführung des benutzten Modells und der Erläuterung der Gitterwirkung. Weiterhin werden dort auch die verwendeten Konventionen fixiert.

Daran schließt sich ein sehr technisches 3. Kapitel an. Leser, die vor allem an den physikalischen Ergebnissen dieser Arbeit interessiert sind, können dieses Kapitel überspringen. Neben den verwendeten Computern werden die Algorithmen und die damit erzielten Autokorrelationszeiten beschrieben. Darüber hinaus werden hier einige neuere Techniken der Datenauswertung präsentiert.

Die Bestimmung der nackten Simulationsparameter wird im 4. Kapitel vorgestellt. Im Verlauf der Untersuchungen wurde deutlich, daß eine genaue Kenntnis des kritischen Hoppingparameters von großer Wichtigkeit für die genaue Bestimmung der Eigenschaften des Phasenübergangs ist, so daß neue, effizientere Methoden zu dessen Messung notwendig wurden. Diese Methoden werden ausführlich dargestellt, und das Verhalten des kritischen Wertes bei endlichem Volumen wird studiert.

Im 5. Kapitel wird die Bestimmung der renormierten Massen und Kopplungen beschrieben. Dazu wurde der Einfluß des endlichen Volumens und der Gitterkonstanten studiert. Aus den Ergebnissen wird die Größe der Gitterkonstanten in physikalischen Einheiten und die kritische Temperatur des Phasenübergangs bestimmt. Abschließend wird das Spektrum in der Nähe des Phasenübergangs betrachtet.

Die Oberflächenspannung und die latente Wärme sind charakterisierende Eigenschaften eines Phasenübergangs erster Ordnung. Ihrer Diskussion und Bestimmung sind die Kapitel 6 und 7 gewidmet.

Im 8. Kapitel wird die Abweichung des Plasmas von einem idealen Gas masseloser Bosonen (reine Strahlung) gemessen. Dies ist für die Zeitentwicklung des Universums von Interesse und geht über die elektroschwache Baryogenese hinaus. Außerdem wird in diesem Kapitel der Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht. Hieraus läßt sich der Einfluß der Unterkühlung auf die Sphaleronrate abschätzen.

Eine abschließende Diskussion der Ergebnisse ist im 9. Kapitel zu finden. Einige, vor allem sehr umfangreiche, Tabellen sind im Anhang zusammengefaßt worden. Auf den Seiten 75 und 76 sind Verzeichnisse der Abbildungen und Tabellen zu finden.

Kapitel 2

Das SU(2)-Higgs-Modell

2.1 Gitterwirkung

Zu Beginn der Arbeit werden zunächst die benutzten Konventionen für die Felder und Parameter dargestellt. Als Ortsraum wird ein kubisch-primitives Raum-Zeit-Gitter in vier Dimensionen gewählt. Wird ein endliches Volumen betrachtet, was in allen Computersimulationen notwendig ist, so werden periodische Randbedingungen für alle Felder gewählt. Die Variablen L_x, L_y, L_z und L_t bezeichnen die Gitterlänge in den vier Richtungen, und durch das Produkt $\Omega := L_x \times L_y \times L_z \times L_t$ wird das Gittervolumen angegeben. Sofern nicht anders angegeben, wird der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten zu $a = 1$ gesetzt.

Für das skalare Feld mit seinen vier reellen Freiheitsgraden $\varphi_0, \ldots \varphi_3$ wird die folgende Parametrisierung gewählt

$$\begin{aligned} \varphi_x &:= \varphi_{x,0}\mathbf{1} + \mathrm{i}\varphi_{x,a}\tau_a \\ &= \begin{pmatrix} \varphi_{x,0} + \mathrm{i}\varphi_{x,3} & \varphi_{x,2} + \mathrm{i}\varphi_{x,1} \\ -\varphi_{x,2} + \mathrm{i}\varphi_{x,1} & \varphi_{x,0} - \mathrm{i}\varphi_{x,3} \end{pmatrix} . \end{aligned} \tag{2.1}$$

Mit $\mathbf{1}$ wird die 2×2 Einheitsmatrix und mit τ_a werden die drei Pauli-Matizen bezeichnet. Das x steht für den Gitterpunkt, dabei werden je nach Zusammenhang die Komponenten mit x, y, z, t oder mit $x_1, \ldots, x_4$ bezeichnet. In dieser Form gilt für φ

$$\varphi_x^+ = \tau_2 \varphi_x^{\mathrm{T}} \tau_2 . \tag{2.2}$$

In verschiedenen Zusammenhängen ist es nützlich, das Feld φ_x in ein reelles Feld ρ_x und ein SU(2)-wertiges Feld α_x zu zerlegen

$$\rho_x^2 := \tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\varphi_x^+ \varphi_x\right) , \qquad \alpha_x := \frac{1}{\rho_x}\varphi_x . \tag{2.3}$$

Das SU(2)-Eichfeld $U_{x\mu}$ wird in seiner fundamentalen Darstellung benutzt und als eine Abbildung von der Mitte der Verbindungslinie zwischen den Gitterorten x und $x + \hat{\mu}$ in die Eichgruppe definiert. Der Zusammenhang mit den Eichfeldern $A_{x\mu}$, wie sie unter anderem in perturbativen Rechnungen üblich sind, läßt sich mit Hilfe der Paralleltransporter

$$U_{x\mu} = \exp(-A_{x\mu}) , \qquad A_{x\mu} = -\mathrm{i}\frac{g}{2}\tau_a A^a_{x\mu} \tag{2.4}$$

herstellen, wobei g die nackte Eichkopplung bezeichnet. Für den kinetischen Term des Eichfeldes wird die Wilson-Plaquettenwirkung [32] benutzt, dabei bezeichnet die Plaquettenvariable U_{pl} das weggeordnete Produkt der Eichfelder um die Plaquette pl

$$\begin{aligned} pl &:= (x; \mu, \nu) \text{ mit } \mu < \nu , \\ U_{pl} &:= U^+_{x,\nu}\, U^+_{x+\hat{\nu},\mu}\, U_{x+\hat{\mu},\nu}\, U_{x,\mu} . \end{aligned} \tag{2.5}$$

In den Feldvariablen schreibt sich die benutzte euklidische Gitterwirkung als

$$\begin{aligned} S[U,\varphi] \;=\; & \beta \sum_{pl} \left(1 - \tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}U_{pl}\right) \\ & + \sum_x \Bigg\{ - \kappa \sum_{\mu=1}^{4} \mathrm{Tr}(\varphi^+_{x+\hat{\mu}} U_{x\mu} \varphi_x) \\ & \quad + \tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}(\varphi^+_x \varphi_x) \\ & \quad + \lambda \left[\tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}(\varphi^+_x \varphi_x) - 1\right]^2 \Bigg\} . \end{aligned} \tag{2.6}$$

In der Gitterwirkung werden die nackten Parameter β, κ und λ verwendet. Die nackte Eichkopplung g und die nackte Higgsbosonenmasse μ_0 ergeben sich daraus zu

$$g^2 = \frac{4}{\beta}\,, \qquad \mu_0^2 = \frac{1-2\lambda}{\kappa} - 8\,. \tag{2.7}$$

Die Bestimmung der renormierten Kopplungen und Massen wird später im Kapitel 5 beschrieben.

Für die spätere Benutzung sollen hier noch die eichinvarianten Operatoren

$$\begin{aligned} L_{\varphi,x\mu} &:= \tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\phi^+_{x+\hat{\mu}} U_{x,\mu}\phi_x\right)\,, \\ L_{\alpha,x\mu} &:= \tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\alpha^+_{x+\hat{\mu}} U_{x,\mu}\alpha_x\right)\,, \\ P_{pl} &:= 1 - \tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}U_{pl}\,, \\ Q_x &:= \left(\rho^2-1\right)^2 \end{aligned} \tag{2.8}$$

definiert werden. Den Operatoren $L_{\varphi,x\mu}$, Q_x und P_{pl} kommt in vielen Zusammenhängen eine besondere Bedeutung zu. Ihre Erwartungswerte sind die Dichten der extensiven Größen, die den nackten Kopplungen β, κ und λ der Wirkung zugeordnet sind.

Kapitel 3

Simulationstechniken

In diesem Kapitel werden die verwendeten Computer und Algorithmen beschrieben. Darüberhinaus werden verschiedene Verfahren zur Datenanalyse vorgestellt.

3.1 Computer und Datenorganisation

Die numerischen Simulationen dieser Arbeit wurden im wesentlichen auf den APE-Quadrics Computern des DESY-IfH in Zeuthen und der CRAY Y-MP 8/864 des HLRZ in Jülich durchgeführt. Diese Computer unterscheiden sich grundlegend in ihrer Architektur und damit in der Programmierung, wie weiter unten noch dargestellt werden wird. Darüber hinaus ist für die APE-Quadrics die Programmiersprache *TAO* zu verwenden, so daß zwei Versionen des Simulationsprogramms geschrieben worden sind. Die TAO-Programme wurden zusammen mit Zoltán Fodor, Karl Jansen und István Montvay erstellt, der FORTRAN77-Code für die CRAY zusammen mit Jochen Heitger. Zur Auswertung und für einige Simulationen auf kleinen Gittern wurden HP9000/735 Workstations des DESY in Hamburg verwendet. Da auf diesen Maschinen ein sehr guter FORTRAN77-Compiler zur Verfügung steht, konnten hier die CRAY-Programme mit kleinen Modifikationen verwendet werden.

APE-Quadrics

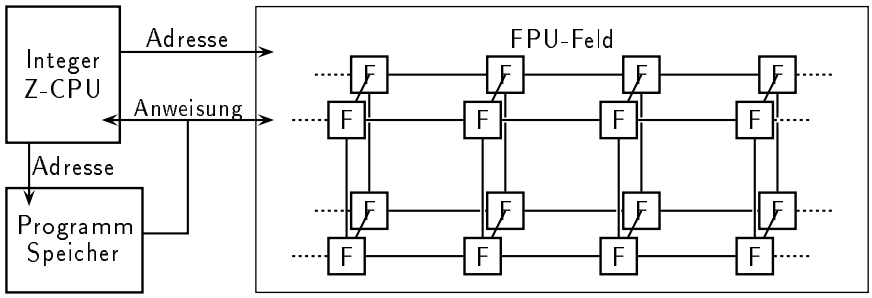
Die Maschinen wurden von der italienischen APE-Kollaboration entwickelt. Die kommerzielle Version wird unter dem Namen Quadrics von der Firma Alenia vertrieben. Die Rechner sind als massiv parallele Maschinen konstruiert und können aus Hardwaregründen nur nach dem SIMD-Prinzip* programmiert werden. Zur Erläuterung dieses Prinzips soll zunächst die Architektur beschrieben werden, sie ist in Abb. 3.1 skizziert.

Die Rechner besitzen nur eine einzige Integer-CPU, so daß parallele Operationen mit ganzen Zahlen nicht möglich sind. Die Integer-CPU wird im wesentlichen zur Adreßberechnung, zur Schleifensteuerung und zur Auswertung logischer Operationen benutzt. Den Kern der Maschine bilden die parallelen 32-Bit Fließkommaprozessoren (FPU), die auf den Gitterpunkten eines dreidimensionalen primitiven Raumgitters angeordnet sind. Jeder Fließkommaprozessor besitzt seinen eigenen Datenspeicher und kann direkt auf den Datenspeicher seiner sechs nächsten Nachbarn zugreifen. Weiterhin können die Prozessoren am Rand des Gitters auch auf die Daten der Prozessoren am gegenüberliegenden Rand zugreifen. Dies ist für die Simulation von Feldtheorien mit periodischen oder antiperiodischen Randbedingungen wichtig.

Da es nur einen einzigen Programmspeicher gibt, führen ***alle*** Fließkommaprozessoren simultan die gleiche Operation aus. Es ist aber möglich, einzelne Prozessoren zu sperren, so daß diese keine Operation ausführen, was unter anderem für die im Abschnitt 3.2 beschrieben Metropolis-Schritte notwendig ist. Für die Simulation von lokalen Gitterfeldtheorien bietet sich eine Abbildung der Gitter-

*SIMD: single instruction multiple data

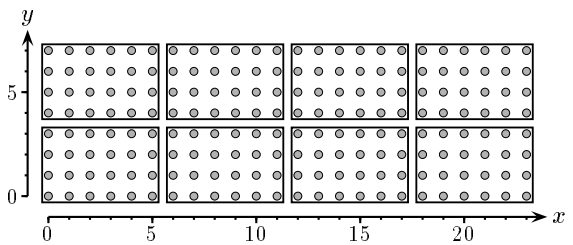
Abbildung 3.1: *Schematische Darstellung der Architektur eines Quadrics-Computers mit $N \times 2 \times 2$ Prozessoren. Mit* F *werden die einzelnen Fließkommaprozessoren bezeichnet. Jeder dieser Prozessoren besitzt einen eigenen Datenspeicher.*



punkte auf die Prozessoren entsprechend Abb. 3.2 an. Dadurch ist es nur selten notwendig, Daten über mehr als einen Prozessor weiterzureichen.†

Für die Rechnungen der vorliegenden Untersuchung wurden Maschinen mit den Topologien $(2 \times 2 \times 2)$, $(32 \times 2 \times 2)$ und $(8 \times 8 \times 4)$ verwendet. Bei kleinen Gittergrößen ist es sinnvoll, mehrere Systeme gleichzeitig zu simulieren und so die benötigte Kommunikation zwischen den Prozessoren zu reduzieren.

Abbildung 3.2: *Verteilung der Punkte eines 24×8 Gitters auf die Prozessoren einer 4×2 Parallelmaschine. Die Gitterpunkte eines Kastens werden auf einen Prozessor abgebildet.*



CRAY Y-MP

Bei der CRAY Y-MP handelt es sich um einen Vektorrechner. Derartige Rechner können Vektoroperationen wie zum Beispiel

$$C_i = A_i + B_j \,, \qquad C_i = C_i \cdot A_i \,, \qquad C = \sum_i A_i \tag{3.1}$$

sehr schnell ausführen. Es ist dabei zu beachten, daß nach dem Beginn der Vektoroperation auf der rechten Seite keine Abhängigkeit von C_j mit $j \neq i$ auftreten darf. Um derartige Abhängigkeiten zu vermeiden werden die Gitterpunkte entsprechend den schwarzen und weißen Feldern eines vierdimensionalen „Schach-Hyperbrettes“ aufgeteilt. Die Feldvariablen der weißen Gitterpunkte werden in einem und die der schwarzen in einem zweiten Vektor gespeichert. Wie im nächsten Abschnitt beschrieben wird, hängt der neue Wert einer Feldvariablen nur vom alten Wert des Feldes an dem betreffenden Gitterpunkt und von den Werten des Feldes an den direkt benachbarten Gitterpunkten ab. Letztere sind aber „Schachfeldern“ der anderen Farbe zugeordnet und in dem anderen Vektor gespeichert. Somit können alle Feldvariablen einer Farbe mit Operationen der obigen Art erneuert werden.

3.2 Algorithmen

In diesem Abschnitt sollen die benutzen Algorithmen kurz vorgestellt werden. Die Grundlagen der numerischen Simulation von Gittermodellen mit Hilfe von Markov-Prozessen können der Ref. [33]

†In der Berechnung der Plaquetten-Wirkung sind Daten an den übernächsten Nachbarn zu übertragen

entnommen werden.

In den Simulationen dieser Untersuchung werden zur Erneuerung der Feldvariablen Wärmebad- und Spiegelungsalgorithmen verwendet. Die Idee der Spiegelungsalgorithmen beruht auf dem Metropolis-Algorithmus. Um eine große Schrittweite zu erreichen, wird ein neuer Wert für die Feldvariable gesucht, der die Wirkung S annähernd invariant läßt. Dieser Wert wird in dem anschließenden Metropolis-Schritt mit einer Wahrscheinlichkeit $p_{\rm acc} \approx 1$ akzeptiert. Zur Sicherstellung der Ergodizität der Auffrischung wird zusätzlich für alle Feldvariablen noch ein Wärmebadalgorithmus verwendet.

Auf den APE-Quadrics Parallelmaschinen wurde in allen Algorithmen der Zufallszahlengenerator aus [34] verwendet. Bei der Initialisierung des Generators ist darauf zu achten, daß alle Prozessoren der Maschine unabhängig initialisiert werden. Bei geeigneter Initialisierung besitzt der zugrundeliegende Algorithmus [35] eine extrem lange Periode ($> 10^{171}$), direkt aufeinander folgende Glieder weisen aber eine starke Korrelation auf. Werden an geeigneter Stelle einige 100 Vorschläge verworfen, so zeigen die Folgeglieder ein chaotisches Verhalten [34]. Im Gegensatz zu vielen anderen Zufallszahlengeneratoren, läßt sich dieser Algorithmus auf Fließkommaprozessoren implementieren.

Auf der CRAY Y-MP wurde der Zufallszahlengenerator „RANF“ verwendet der im HLRZ in Jülich unter FORTRAN77 in vektorisierter Form zur Verfügung steht [36] und auf den Workstations der Generator „G05CAF“ aus der NAGLIB.

Da im nachfolgenden Abschnitt die Effizienz der Algorithmen zur Auffrischung des φ_x-Feldes explizit verglichen wird, werden diese Algorithmen im weiteren detailliert vorgestellt.

Wärmebad- und Spiegelungsalgorithmus für das Higgsfeld φ_x

Für das Update der Higgsfeldvariablen $\varphi_{x,\alpha}$ mit $\alpha \in \{0,\ldots,3\}$ werden die von B. Bunk [37] vorgeschlagenen Algorithmen benutzt. Ausgehend von Gl. (2.6) kann die Wirkung für ein einzelnes φ_x bei festgehaltenem $U_{x\mu}$ und $\overline{\varphi}_x := \{\varphi_y | y \neq x\}$ in der Form

$$\begin{aligned} S_\varphi(\varphi_x) &= \zeta_x \left[\sum_{\alpha=0}^{3} \left(\varphi_{x,\alpha} - \frac{1}{\zeta_x} b_{x,\alpha}\right)^2\right] \\ &\quad + \lambda\left(\rho_x^2 - \frac{1}{2\lambda}(2\lambda - 1 + \zeta_x)\right)^2 \\ &\quad + \text{const.}\,, \end{aligned} \tag{3.2}$$

$$\begin{aligned} b_{x,0} &:= \frac{\kappa}{2}\sum_{\nu=1}^{4} \mathrm{Tr}\Big(\varphi^+_{x+\hat{\nu}} U_{x\nu} \\ &\qquad + U_{x-\hat{\nu},\nu}\varphi_{x-\hat{\nu}}\Big)\,, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{x,a} &:= \frac{\kappa}{2}\sum_{\nu=1}^{4} \mathrm{Tr}\Big(\varphi^+_{x+\hat{\nu}} U_{x\nu}\, \mathrm{i}\tau_a \\ &\qquad - \mathrm{i}\tau_a U_{x-\hat{\nu},\nu}\varphi_{x-\hat{\nu}}\Big)\,, \end{aligned}$$

dargestellt werden. Hierbei hängt $b_{x,\alpha}$ nur von $U_{x\mu}$ und $\overline{\varphi}_x$ ab. Durch die Variable ζ_x kann ein zu φ_x^2 proportionaler Term vom Gausschen Teil der Wirkung in den quartischen Wechselwirkungsteil verschoben werden.

Zur Konstruktion eines ergodischen Wärmebadalgorithmuses werden nun vier Variablen $\widetilde{\varphi}_{x,\alpha}$ mit einer dem quadratischen Teil der Wirkung entsprechenden Wahrscheinlichkeitsverteilung vorgeschlagen. Diese vier Vorschläge werden simultan in einem Metropolis-Schritt mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\rm acc}(\widetilde{\varphi}_x) = \exp\left(\lambda[\widetilde{\rho}_x^2 - \tfrac{1}{2\lambda}(2\lambda - 1 + \zeta_x)]^2\right) \tag{3.3}$$

akzeptiert. Wird hingegen φ_x durch φ'_x ersetzt

$$\varphi_{x,\alpha} \;\mapsto\; \varphi'_{x,\alpha} := 2\frac{1}{\zeta_x} b_{x,\alpha} - \varphi_{x,\alpha}\,, \tag{3.4}$$

so erhält man einen Spiegelungsalgorithmus, der sich als extrem effektiv in der Reduktion der Autokorrelation hintereinanderfolgender Feldkonfigurationen erweist, siehe Abschnitt 3.3. Da die obige Ersetzung nur den quadratischen Teil der Wirkung invariant läßt, ist auch der Vorschlag (3.4) nur entsprechend (3.3) zu akzeptieren.

Zur Optimierung der Akzeptanzraten der Algorithmen sollten die Minima des quadratischen Teils und des quartischen Teils in Gl. (3.2) zusammenfal-

len. Dies führt für ζ_x auf die Bedingung

$$2\lambda|b_x|^2 = \zeta_x^2(\zeta_x + 2\lambda - 1)\,, \quad |b_x| := \sqrt{\sum_{\alpha=0}^{3} b_{x,\alpha} b_{x,\alpha}}\,. \tag{3.5}$$

Da sich diese Gleichung nicht in der erforderlichen Geschwindigkeit lösen läßt, wird in den Programmtexten eine approximative Lösung implementiert. Ausgehend von der Beobachtung $\zeta_x = 1$ für $|b_x| = 1$ wird $\zeta_x = 1 + \varepsilon_x$ gesetzt und es ergibt sich:

$$\zeta_x = 1 - 2\lambda + 2\lambda \cdot |b_x|^2 + \mathcal{O}(\varepsilon_x^2, \lambda\varepsilon_x)\,. \tag{3.6}$$

In allen Simulationen dieser Arbeit wurden bei den benutzten kleinen λ-Werten $\lambda = \mathcal{O}(10^{-4})$ mit dieser Approximation Akzeptanzraten von mehr als 98% erreicht.

Spiegelungsalgorithmus für die Higgsfeldlänge ρ_x

In einem Teil der Untersuchungen wurde anstatt des oben beschriebenen Spiegelungsalgorithmus für das Feld φ_x der von Z. Fodor und K. Jansen [38] vorgeschlagene Spiegelungsalgorithmus für das Feld ρ_x verwendet. Aus der Wirkung (2.6) ergibt sich für $S_\rho(\rho_x)$ bei festem $U_{x\mu}$, α_x und $\overline{\rho}_x := \{\rho_y | y \neq x\}$

$$\begin{aligned} S_\rho(\rho_x) \quad &= \quad -c_x \cdot \rho_x + \rho_x^2 + \lambda\left(\rho_x^2 - 1\right)^2 \\ &\quad - 3\log(\rho_x) \end{aligned} \tag{3.7}$$

$$c_x := \kappa \sum_{\mu=1}^{4} \mathrm{Tr}\left(\varphi^+_{x+\hat{\mu}} U_{x\mu} \alpha_x + \alpha_x^+ U_{x-\hat{\mu},\mu} \varphi_{x-\hat{\mu}}\right)\,.$$

Der Term $-3\log(\rho_x)$ ergibt sich aus der Transformation des Integrationsmaßes in Polarkoordinaten. Zur Konstruktion eines Spiegelungsalgorithmuses wird nun mit Hilfe der Taylorentwicklung von $S_\rho(\rho_x)$ und anschließender Newtoniteration ein ρ'_x in Abhängigkeit von ρ_x mit

$$S_\rho(\rho'_x) = S_\rho(\rho_x)\,, \qquad \rho'_x \neq \rho_x\,, \tag{3.8}$$

bestimmt. Da $S_\rho(\rho_x)$ bezüglich des Minimums nicht symmetrisch ist, ergibt sich bei der Spiegelung eine nichttriviale Gramsche Determinante. Diese ist in einem zusätzlichen Metropolis-Schritt zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned} &p_{\mathrm{acc}}(\rho'_x) \\ &\quad = \quad \min\left(1, \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho_x} S_\rho(\rho_x)\right] \cdot \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho'_x} S_\rho(\rho'_x)\right]^{-1}\right)\,. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Im Vergleich zum Metropolis-Algorithmus bietet dieser Algorithmus eine deutlich Reduktion der integrierten Autokorrelationszeit [38, 39], er ist aber dem vorstehenden Spiegelungsalgorithmus für φ_x deutlich unterlegen, wie im Abschnitt 3.3 diskutiert wird.

Algorithmen für das Eichfeld

Für das Eichfeld $U_{x\mu}$ und den „SU(2)-Winkel“ α_x des Skalarfeldes wird der unter anderem in [33, 38] beschriebene Spiegelungsalgorithmus benutzt. Für die Eichfelder wird zusätzlich der Wärmebadalgorithmus aus [40, 41] angewandt.

Zur Auffrischung der Feldkonfigurationen wird eine Kombination der vorgestellten Algorithmen in einer festen, periodisch wiederholten Reihenfolge verwendet. Diese feste Reihenfolge wird im folgenden als *Sweep* bezeichnet. Innerhalb eines Sweeps wird für jede Feldvariable mindestens einmal der entsprechende Wärmebadalgorithmus aufgerufen, so daß die Ergodizität sichergestellt ist.

3.3 Autokorrelationszeit

In einem Monte-Carlo-Verfahren erzeugte Feldkonfigurationen sind in der Regel nicht stochastisch unabhängig, was zu deutlichen Korrelationen unter den Meßwerten führt. Bezeichnet $\mathcal{B}_n$ den Meßwert der Größe $\mathcal{B}[U_{x\mu}, \varphi_x]$ auf der n-ten Konfiguration, so wird die Autokorrelationsfunktion $\Gamma_{\mathcal{B}}(t)$ durch

$$\Gamma_{\mathcal{B}}(t) := \lim_{n\to\infty} \frac{1}{N-t} \sum_{n=1}^{N-t} \left(\mathcal{B}_{n+t} - \overline{\mathcal{B}}\right)\left(\mathcal{B}_n - \overline{\mathcal{B}}\right) \tag{3.10}$$

definiert. Dabei steht $\overline{\mathcal{B}} := \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \mathcal{B}_n$ für den Mittelwert und N für die Anzahl der zur Verfügung

stehenden Messungen. Aus der Autokorrelationsfunktion lassen sich zwei verschiedene Autokorrelationszeiten definieren: Zum einen die exponentielle Autokorrelationszeit $\tau_{\exp,\mathcal{B}}$, die in der üblichen Weise durch den exponentiellen Abfall der Autokorrelationsfunktion für große t-Werte definiert wird, und zum anderen die integrierte Autokorrelationszeit $\tau_{\mathrm{int},\mathcal{B}}$:

$$\tau_{\mathrm{int},\mathcal{B}} := \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \frac{\Gamma_{\mathcal{B}}(t)}{\Gamma_{\mathcal{B}}(0)} \,. \tag{3.11}$$

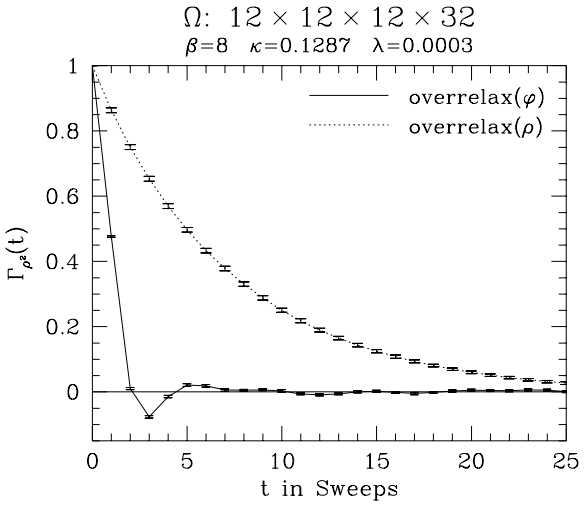
In numerischen Simulationen führt die naive Ersetzung $\infty \rightarrow N$ zu falschen Ergebnissen, siehe zum Beispiel [42]. In dieser Untersuchung wird die Summe deshalb an der ersten Nullstelle der Autokorrelationsfunktion mit der längsten Autokorrelationszeit abgeschnitten. Die auf diese Weise bestimmten Zeiten sind mit dem in [42] vorgeschlagenen Verfahren verträglich.

Im Fall eines reinen exponentiellen Abfalls und $\tau \gg 1$ ergibt sich aus beiden Definitionen der gleiche Wert. Die Fehler der Autokorrelationsfunktionen und -zeiten wurden mit Hilfe des Jackknifeverfahrens bestimmt.

In den Simulationen zur Bestimmung des kritischen Hoppingparameters mit Hilfe der 2-Kopplungs-Methode und den Simulationen mit beschränktem Ordnungsparameter (Kapitel 4) wurde die Autokorrelation der Größe $L_{\varphi,x\mu}$ betrachtet. In allen anderen Simulationen wurde die Autokorrelationsfunktion für die Größen ρ_x^2, U_{pl}, $[\rho_x^2 \rho_{x+L_t/2}^2]$ und die jeweils größte gemessene Wilson-Schleife untersucht. Für die integrierten Korrelationszeiten der Größen ρ_x^2 und $[\rho_x^2 \rho_{x+L_t/2}^2]$ ergeben sich die gleichen Werte, für die anderen Größen ergeben sich kürzere Zeiten. Typische Beispiele sind in der Referenz [19] angegeben.

Im weiteren wird die Autokorrelationszeit der Größe ρ_x^2 diskutiert. Bei Verwendung des Spiegelungsalgorithmuses für ρ_x gilt $\tau_{\mathrm{int},\rho_x^2} \approx \tau_{\exp,\rho_x^2}$. Dies ist ein wichtiger Hinweis dafür, daß die Higgsfeldlänge die langsamste kritische Mode des Algorithmuses beschreibt. Bei Verwendung des Spiegelungsalgorithmuses für das φ-Feld kann die Autokorrelationsfunktion bei relativ großen Massen (in Gittereinheiten) nicht durch einen exponentiellen Abfall beschrieben werden, ein Beispiel dafür ist in der Abbildung 3.3 zu sehen. Bei kleineren Massen verschwindet dieses Überschwingen, und es gilt auch hier $\tau_{\mathrm{int},\rho_x^2} \approx \tau_{\exp,\rho_x^2}$.

Abbildung 3.3: *Vergleich der Autokorrelationsfunktion $\Gamma_{\rho^2}(t)$ bei Verwendung der Spiegelungsalgorithmen für φ_x bzw. ρ_x. Es wurde $\tau_{\mathrm{int}} = 0.91$ Sweeps bzw. $\tau_{\mathrm{int}} = 7.4$ Sweeps gemessen.*



In der Abbildung 3.3 werden die nachfolgend beschriebenen Zusammensetzungen der Sweeps miteinander verglichen: Wird mit $\mathrm{s}(f)$ und $\mathrm{w}(f)$ der Spiegelungs- bzw. der Wärmebadalgorithmus für das Feld f bezeichnet, so gibt die Kurve „overrelax(ρ)“ die Autokorrelationsfunktion der Zusammensetzung $\{\mathrm{w}(U_{x\mu}),\ 2{\times}\mathrm{w}(\varphi_x),\ \mathrm{s}(\rho_x),\ 2{\times}\mathrm{w}(\varphi_x),\ \mathrm{s}(U_{x\mu}),\ \mathrm{s}(\alpha_x),\ \mathrm{s}(\rho_x),\ \mathrm{s}(U_{x\mu})\}$ und die Kurve „overrelax(φ_x)“ die der Zusammensetzung $\{\mathrm{w}(U_{x\mu}),\ \mathrm{w}(\varphi_x),\ \mathrm{s}(U_{x\mu}),\ 3{\times}\mathrm{s}(\varphi_x)\}$ an. Da die notwendigen Berechnungen für den φ-Spiegelungsalgorithmus erheblich einfacher sind, ergibt sich eine um einen Faktor 14 kürzere Autokorrelationszeit wenn der Rechenzeitbedarf verglichen wird. Die beste Sweepzusammensetzung aus [19] ergibt bei diesen Parametern $\tau_{\mathrm{int}} \approx 10$ Sweeps, ist aber beim Vergleich der CPU-Zeiten nur geringfügig langsamer als die langsamere der beiden obigen Zusammensetzungen.

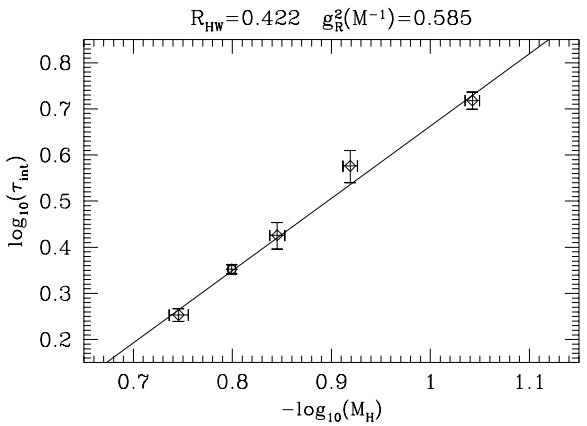
In den Untersuchungen des Kapitels 5 wird der Einfluß der Gitterkonstanten auf die renormierten Massen und Kopplungen studiert. Als Nebenprodukt dieser Untersuchung stehen nun Werte für die integrierte Autokorrelationszeit der oben mit „overrelax(φ)“ bezeichneten Sweepzusammensetzung für verschiedene Higgsmassenwerte und konstante renormierte Kopplungen zur Verfügung.

Hieraus soll eine Bestimmung des *dynamischen kritischen Exponenten* $z(\rho_x^2)$ versucht werden. Die Korrelationslänge $\xi = 1/M$ ist für $\xi \to \infty$ mit der integrierten Autokorrelationszeit verknüpft [33]

$$\tau_{\mathrm{int},\mathcal{B}} \propto \xi^{z(\mathcal{B})} . \tag{3.12}$$

In der Abbildung 3.4 ist der Logarithmus der integrierten Autokorrelationszeit gegen den Logarithmus der Higgsbosonmasse aufgetragen. Für die Fitgerade ergibt sich $\chi^2 = 2.5$. Somit kann der gesamte hier untersuchte M_H-Bereich in die Auswertung einbezogen werden, und aus der Steigung der Fitgeraden resultiert ein Exponent $z(\rho_x^2) = 1.57(7)$. Der Fehler des Exponenten wurde aus normalverteilten Werten bestimmt.

Abbildung 3.4: *Messung des dynamischen kritischen Exponenten. Das verwendete Update wird im Text beschrieben und alle Werte sind bei konstanten renormierten Kopplungen bestimmt worden. Die Fitkurve ($\chi^2 = 2.5$) ergibt einen Exponenten $z = 1.57(7)$.*



Bei Verwendung von Metropolis- und Wärmebadalgorithmen ergibt sich üblicherweise ein Wert $z \approx 2$. Somit ist hier eine leichte Verbesserung festzustellen. Durch eine Optimierung der Zusammensetzung der Sweeps kann unter Umständen eine weitere Reduktion des kritischen Exponenten erreicht werden.

3.4 Fitkurven

In vielen Untersuchungen ist an die Meßdaten eine Fitfunktion $f(t,a)$ anzupassen, z.B. in der Massenbestimmung aus dem exponentiellen Abfall einer Korrelationsfunktion. Zur Verdeutlichung wird ein Satz von Meßgrößen $x(t)$, die von einer Variablen t abhängen, diskutiert. Wird angenommen, daß bei geeigneter Wahl der Parameter $a_1, \ldots, a_P$

$$\langle x(t) \rangle = f(t,a) \tag{3.13}$$

gilt, so ist es das Ziel dieser Untersuchungen aus Meßwerten für $x(t)$ die wahrscheinlichsten Werte der Parameter a_s zu bestimmen und eine Aussage darüber zu gewinnen, ob die Annahme (3.13) erfüllt ist.

Auf einer diskreten Menge $\{t_1, \ldots, t_M\}$ werden dazu $i = 1, \ldots, N$ Meßwerte $x_i(t_j)$, die durch die Fitfunktion f beschrieben werden sollen, bestimmt. Es kann im weiteren davon ausgegangen werden, daß $x_i(t_j)$ und $x_{i'}(t_{j'})$ für $i \neq i'$ statistisch unabhängig sind, denn in einer praktischen Untersuchung ist dieses durch die Unterteilung der Daten in Blöcke ausreichender Länge und die Benutzung der Blockmittelwerte als Meßwerte immer erreichbar. Dagegen sind $x_i(t_j)$ und $x_i(t_{j'})$ mit $t_j \neq t_{j'}$ in der Regel korreliert, wenn sie auf der gleichen Konfiguration bestimmt worden sind. Die Auswirkungen dieser Korrelationen auf die Fitfunktion werden im weiteren beschrieben.

Unter der Annahme einer Gausschen Verteilung der $x_i(t_j)$, kann mit der *Maximum-Likelihood-Methode* aus den Meßwerten $x_i(t_j)$ eine Abschätzung für die Parameter a_s gewonnen werden. Dazu ist das Minimum von

$$\chi^2 = \sum_{t,t'} \left[f(t,a) - \overline{x}(t) \right] M(t,t') \left[f(t',a) - \overline{x}(t') \right] \tag{3.14}$$

im Bezug auf die a_s zu bestimmen. Hierbei bezeichnet $\overline{x}(t) := N^{-1}\sum_i x_i(t)$ den Mittelwert und $M(t,t')$ steht für die Inverse der Kovarianzmatrix, die sich wie folgt aus den Meßwerten $x_i(t)$ abschätzen läßt

$$\begin{aligned} M(t,t') &= N\,C^{-1}(t,t')\,, \\ C(t,t') &= \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}\Big[x_i(t)-\overline{x}(t)\Big] \\ &\quad\cdot\Big[x_i(t')-\overline{x}(t')\Big]\,. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Aus dem χ^2-Wert am Minimum kann abgeschätzt werden, wie gut die Meßdaten durch die Fitfunktion beschrieben werden. Für gute *Fits* gilt $\chi^2 \approx M - P$, dabei gibt M die Dimension der Matrix $C(t,t')$ und P die Anzahl der Parameter a_s an. Die Differenz $M-P$ wird im weiteren als die Anzahl der Freiheitsgrade des Fits bezeichnet. Ergeben sich zu große χ^2-Werte so sind Zweifel angebracht, daß sich die Daten durch die Fitfunktion beschreiben lassen, und zu kleine χ^2-Werte sind ein Indiz für Fehler in der Bestimmung der Korrelationsmatrix $C(t,t')$.

An dieser Stelle treten die Probleme des Verfahrens auf. Wie in [43] eindrucksvoll demonstriert wird, ergeben sich zu kleine Eigenwerte in der Korrelationsmatrix $C(t,t')$, wenn die Anzahl der Messungen N im Vergleich zur Dimension M der Matrix $C(t,t')$ zu klein ist. Dieses führt zu einer drastischen Erhöhung des χ^2-Erwartungswertes und zu Deformationen der Fitfunktion. Es wird gezeigt, daß zum Erhalt einer guten Korrelationsmatrix $N > \max(M^2, 10(M+1))$ Meßwerte notwendig sind.

Um auch bei einer geringeren Zahl von Meßwerten zu aussagekräftigen χ^2-Werte zu gelangen, wurde in [44] vorgeschlagen, die E größten Eigenwerte der normierten Korrelationsmatrix $\widetilde{C}(t,t') := [C(t,t)]^{-1/2}\ C(t,t')\ [C(t',t')]^{-1/2}$ weitgehend unverändert zu belassen und die $M-E$ kleinsten Eigenwerte durch ihren Mittelwert λ_i' zu ersetzen

$$\lambda_i' = K\max(\lambda_i, \lambda_{\min})\,, \tag{3.16}$$

mit

$$\lambda_{\min} = \frac{1}{M-E}\sum_{i=E+1}^{M}\lambda_i\,,$$

$$K^{-1} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\max(\lambda_i, \lambda_{\min})\,.$$

Dabei werden die Eigenwerte von $\widetilde{C}$ mit λ_i bezeichnet, und es wird angenommen, daß die λ_i in absteigender Reihenfolge angeordnet sind. Dem Ergebnis aus [43] entsprechend wird in [44] vorgeschlagen $E \approx \sqrt{N}$ exakte Eigenwerte zu behalten. Mit diesem Wert haben die Autoren in den praktischen Tests der Methode gute χ^2-Werte erhalten, aus denen Rückschlüsse auf die Güte des Fits gewonnen werden konnten.

Zur Bestimmung der Parameterwerte a_s wird ein zweistufiges Vorgehen empfohlen. Im ersten Schritt wird, wie oben beschrieben mit der geglätteten Kovarianzmatrix geprüft, ob sich die Meßdaten durch die Fitfunktion beschreiben lassen, unter Umständen ist es dazu notwendig den t-Bereich einzuschränken. Ist der *optimale* t-Bereich bestimmt, so werden die a_s im zweiten Schritt aus *unkorrelierten Fits* bestimmt, d.h. die Nichtdiagonalelemente von $C(t,t')$ werden auf Null gesetzt. Diese Vorgehen führte in [44] zu besseren a_s-Werten als die ausschließliche Verwendung der geglätteten Kovarianzmatrix.

In den Massenfits dieser Arbeit werden die Eigenwerte der unnormierten Korrelationsmatrix $C(t,t')$ entsprechend Gl. (3.16) ersetzt.

3.5 Gewichtung und Taylorprojektion

In einigen Untersuchungen, z.B. der Bestimmung der kritischen Parameter, ist es notwendig den Wert einer nackten Kopplung so abzustimmen, daß die Meßwerte bestimmte Bedingungen erfüllen. In diesem Fall ist es erforderlich die Meßwerte für verschiedene Werte der betrachteten nackten Kopplung zu ermitteln. Ist das zu untersuchende Intervall der nackten Kopplung klein, so können die benötigten Daten in einer einzigen Simulation bei einem festen Wert der nackten Kopplung gewonnen werden.

Ferrenberg-Swendsen Gewichtung

Das hier benutzte Verfahren geht auf Ferrenberg und Swendsen [45] zurück und wird auch in modernen Lehrbüchern [33] beschrieben, so daß es hier nur aus Gründen der Vollständigkeit am Beispiel der Kopplung κ skizziert wird. Der Erwartungswert des Operators $\mathcal{A}$, gemessen mit Hoppingparameter κ_s, läßt sich aus den Erwartungswerten beim Hoppingparameter κ_m bestimmen

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\kappa_s} = \frac{\left\langle \mathcal{A} \, \exp\left(2(\kappa_s - \kappa_m) \sum_{x,\mu} L_{\varphi,x\mu}\right) \right\rangle_{\kappa_m}}{\left\langle \exp\left(2(\kappa_s - \kappa_m) \sum_{x,\mu} L_{\varphi,x\mu}\right) \right\rangle_{\kappa_m}} . \tag{3.17}$$

Wird dies in Monte-Carlo-Simulationen angewandt, so tritt für sehr große $\Delta\kappa := (\kappa_s - \kappa_m)$ das Problem auf, daß mit dem Wahrscheinlichkeitsmaß $\mathcal{D}\varphi\,\mathcal{D}U \exp(-S|_{\kappa_m})$ nur Konfigurationen vorgeschlagen werden, die durch die Exponentialfunktion in den Operatoren nur sehr kleine Beiträge zu $\langle \mathcal{A} \rangle_{\kappa_s}$ liefern. Dagegen werden Konfigurationen, die große Beiträge liefern, nur mit einer so geringen Wahrscheinlichkeit vorgeschlagen daß sie in der praktischen Simulation gar nicht auftreten können. Dies schränkt das maximale $\Delta\kappa$, in dem gute Resultate zu erwarten sind, ein.

In der Bestimmung statistischer Fehler für gewichtete Meßwerte sind die Korrelationen zwischen dem Nenner und dem Zähler in Gl. (3.17) zu berücksichtigen. Eine separate Fehlerabschätzung für Nenner und Zähler und die anschließende Anwendung der Fehlerfortpflanzung führt nicht zu glaubwürdigen Ergebnissen. Mit Hilfe des Bootstrap- oder auch des Jackknifeverfahrens lassen sich aus der Variation der $\langle \mathcal{A} \rangle_{\kappa_s}$-Werte der verschiedenen Bootstrap- oder Jackknifeproben realistische Fehler bestimmen, wenn der Nenner und der Zähler von $\langle \mathcal{A} \rangle_{\kappa_s}$ aus der jeweils gleichen Probe bestimmt werden.

Taylorprojektion

Falls die Taylorentwicklung des Erwartungswertes $\langle \mathcal{A} \rangle$ bezüglich κ hinreichend schnell konvergiert, können auch Aussagen für größere $\Delta\kappa$ den Ergebnissen eines Laufs bei κ_m entnommen werden. Dazu werden durch Gewichtung $\langle \mathcal{A} \rangle_{\kappa_{s,i}}$-Werte für einige $\kappa_{s,i}$ in der Umgebung von κ_m bestimmt. Aus den erhaltenen Werten wird durch einen Fit ein Taylorpolynom bestimmt mit dessen Hilfe $\langle \mathcal{A} \rangle_{\kappa_f}$ bei dem gewünschten κ_f ermittelt wird.

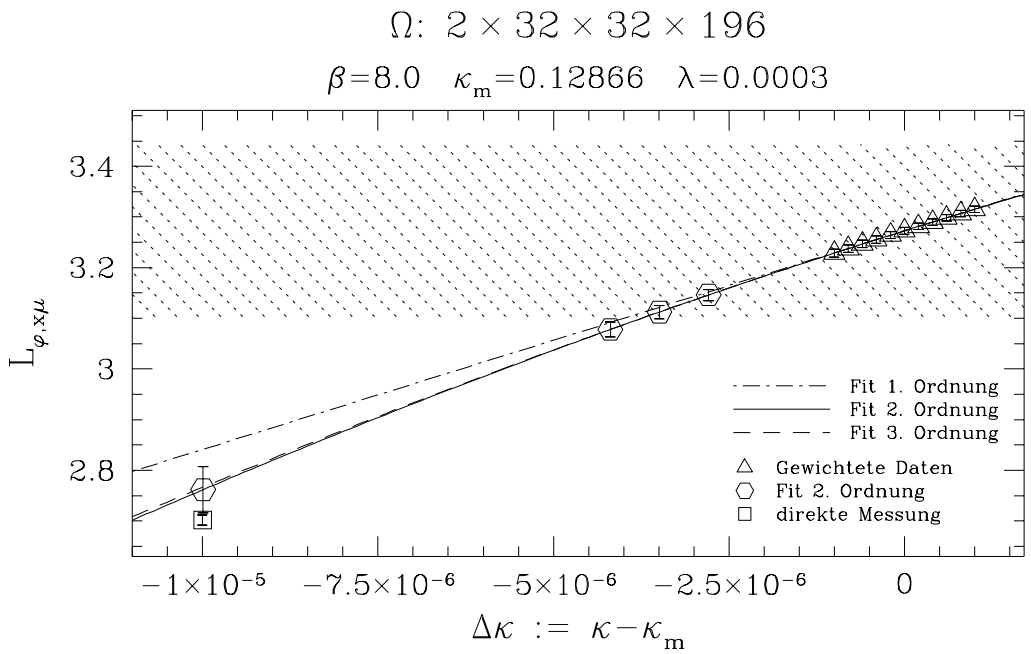
Diese Verfahren wird in Abbildung 3.5 für den Operator $L_{\varphi,x\mu}$ dargestellt. In der Umgebung von $\kappa_m = 0.12866$ wurden 11 Meßwerte durch Gewichten bestimmt. Anschließend wurde unter anderem zu der Stelle $\kappa_f = 0.12865$ projiziert, wo in einer zweiten Simulation ein direkter Meßwert für $\langle L_{\varphi,x\mu} \rangle$ bestimmt worden ist. Die statistischen Fehler wurden mit Hilfe des Bootstrapverfahrens ermittelt. Auf jeder Bootstrapprobe wurde die Gewichtung zu den $\kappa_{s,i}$, der Fit des Taylorpolynoms und die Projektion zu κ_f wiederholt.

Das Taylorpolynom erster Ordnung in $\Delta\kappa$ erweist sich als unzureichend um den Meßwert bei $\kappa = 0.12865$ zu reproduzieren. Dagegen stimmt der Wert des Polynoms zweiter Ordnung innerhalb der statistischen Fehler mit der direkten Messung überein und die dritte Ordnung liefert keine signifikante Veränderung mehr, wie auch der Taylorkoeffizient der dritten Ordnung nicht mehr signifikant ist. Für die Operatoren P_{pl} und Q_x ergibt sich das gleiche Bild.

Abschließend ist noch zu bemerken, daß die beiden diskutierten Hoppingparameter im metastabilen Bereich des Parameterraums in der Nähe des kritischen Punktes liegen. Durch eine geeignete Wahl der Startkonfiguration kann die Phase in der sich das System während der Simulation befindet gewählt werden. Für die obige Analyse wurde die Higgsphase gewählt. Die Wiederholung der Untersuchung in der symmetrischen Phase ergab ebenfalls eine gute Übereinstimmung zwischen dem Ergebnis der direkten Messung und dem Resultat der Taylorprojektion.

In den Untersuchungen der Kapitel 7 und 8 wird das Taylorpolynom bis zu der Ordnung benutzt, für die sich signifikante Koeffizienten ergeben.

Abbildung 3.5: *$L_{\varphi,x\mu}$ als Funktion von κ. Die Kurven sind Taylorpolynome, die an die gewichteten Daten gefittet sind. Die Simulation wurde mit $\kappa_m = 0.12866$ durchgeführt, der schraffierte Bereich gibt die Varianz von $L_{\varphi,x\mu}$ an.*



Kapitel 4

Renormierungsgruppenfluß und Phasenübergang

Zur Bestimmung der Eigenschaften des Phasenübergangs, wie z.B. der latenten Wärme $\Delta\epsilon$, ist es notwendig, Simulationen bei der kritischen Temperatur T_c durchzuführen. Durch die Verknüpfung der Temperatur mit der Gitterausdehnung in Zeitrichtung muß in den Simulationen $L_t = 1/aT_c$ ganzzahlig gewählt werden, dies ist bei der Wahl der nackten Simulationsparameter zu berücksichtigen.

In der Higgsphase bei $T = 0$ ergibt sich auf dem *Baumgraphenniveau*:

$$M_{H,\mathrm{tree}} := \sqrt{-2\,\frac{1-2\lambda-8\kappa}{\kappa}}\,,$$

$$g^2_{\mathrm{tree}} = \frac{4}{\beta}\,, \quad \lambda_{\mathrm{tree}} = \frac{\lambda}{4\kappa^2}\,. \tag{4.1}$$

Durch die affinlineare Struktur des Nenners von $M_{H,\mathrm{tree}}$ ist zu erwarten, daß Verschiebungen des κ-Wertes für $\kappa \geq \kappa_c$ zu einer großen Änderungen der renormierten Higgsmasse M_H und damit der physikalischen Skala a führen. Die dimensionslosen Kopplungen g^2_{tree} und λ_{tree} werden durch derartige Verschiebungen nicht vergleichbar beeinflußt. Wie die Simulationsergebnisse in Kapitel 5 ergeben, zeigen die renormierten Massen und Kopplungen dieses Verhalten ebenfalls.

Aufgrund dieser Betrachtung ist es naheliegend, den Hoppingparameter κ zu benutzen, um die kritische Temperatur auf den gewünschten Wert einzustellen. Die Parameter β und λ werden dabei unverändert belassen. Bei ausreichend großem räumlichen Volumen ist der Einfluß der durch die Verschiebung der Gitterkonstanten verursachten Änderung des physikalischen Volumens $V_{\mathrm{phys}} = [aL_s]^3$ auf die Simulationsergebnisse gering.

4.1 Kurven konstanter Physik

Wird eine Kontinuumstheorie auf dem Gitter studiert, so ist das Verhalten der Resultate bei abnehmender Gitterkonstanten $a \to 0$ zu studieren. Die Trivialität der „reinen“ ϕ^4-Theorie führt zu der Erwartung, daß auch das SU(2)-Higgs-Modell trivial ist [33], so daß die Bildung des Grenzwertes $a \to 0$ nicht durchgeführt werden kann. Es gibt eine untere Schranke für die Gitterkonstante, die von den renormierten Kopplungen abhängt. Auf diese Weise erhält man eine effektive Kontinuumstheorie, die physikalische Ereignisse mit Impulsen $|p| \ll \pi/a$ beschreibt.

Die beschriebene physikalische Situation muß in Studien des Kontinuumslimes beim Übergang zu einem „feineren“ Gitter unverändert bleiben, d.h. die Werte der renormierten dimensionslosen Kopplungen g^2_R und λ_R dürfen nicht verändert werden. Dies sind zwei Nebenbedingungen für die Wahl der nackten Parameter β, κ und λ, und die Untersuchung verläuft somit entlang einer Kurve im Raum dieser Parameter. Diese Kurven werden als *Kurven konstanter Physik* bezeichnet. Die Theorien entlang dieser Kurven unterscheiden sich im Idealfall nur durch verschiedene Werte der Gitterkonstanten a.

Simulationsergebnisse, die bei gleichen renormierten Kopplungen g_R^2 und λ_R, aber verschiedenem a gewonnen worden sind, sollten in physikalischen Einheiten den gleichen Wert besitzen. Abweichungen von diesem Verhalten werden als *Skalenverletzungen* bezeichnet.

In den nachfolgend beschriebenen Untersuchungen hat sich das folgende Vorgehen zur Wahl der nackten Parameter als sinnvoll erwiesen. Der physikalische Wert der Gitterkonstanten wird durch den Wert der W-Bosonenmasse M_W fixiert, somit kann die Gitterkonstante entlang der Kurven konstanter Physik durch

$$\tau = -\log(M_W) \tag{4.2}$$

parametrisiert werden. Der Fluß der nackten Kopplungen β und λ wird mit Hilfe der Renormierungsgruppengleichung in 1-Schleifen-Störungstheorie bestimmt [46]. Bei der Benutzung der Gleichungen ist zu beachten, daß in der Störungstheorie andere Konventionen verwendet werden als hier durch die Wirkung (2.6) vorgegeben. Mit der Umrechnung

$$\lambda_0 = \frac{\lambda}{4\kappa^2}\,, \qquad g^2 = \frac{4}{\beta} \tag{4.3}$$

gilt für den Fluß der nackten Parameter entlang der Kurven konstanter Physik:

$$\left.\frac{\partial g^2(\tau)}{\partial \tau}\right|_{g_R^2,\lambda_R} = \frac{1}{16\pi^2}\Big[-\frac{43}{3}g^4 + \mathcal{O}(\lambda_0^3,\, \lambda_0^2 g^2,\, \lambda_0 g^4,\, g^6)\Big]\,, \tag{4.4}$$

$$\left.\frac{\partial \lambda_0(\tau)}{\partial \tau}\right|_{g_R^2,\lambda_R} = \frac{1}{16\pi^2}\Big[96\lambda_0^2 + \frac{9}{32}g^4 - 9\lambda_0 g^2 + \mathcal{O}(\lambda_0^3,\, \lambda_0^2 g^2,\, \lambda_0 g^4,\, g^6)\Big]\,. \tag{4.5}$$

Durch numerische Integration der gekoppelten Differentialgleichungen werden aus den Werten für β und λ bei einer vorgegebenen Gitterkonstanten a die neuen Werte bei a' bestimmt. Bei der Umrechnung von $\lambda_0(a')$ in $\lambda(a')$ ist im Prinzip auch die Änderung des Hoppingparameters $\kappa(a') \neq \kappa(a)$ zu berücksichtigen. Dessen relative Änderung entlang der Kurven konstanter Physik erweist sich aber in den folgenden Untersuchungen als so gering, daß sie unberücksichtigt bleiben kann. Die Resultate der numerischen Integration werden im Anhang in Tabelle A.1 angegeben.

Werden die nackten Kopplungen β und λ in der beschriebenen Weise bestimmt, so ist der Hoppingparameter so zu wählen, daß $T_c = 1/a\, L_t$ gilt. Der Bestimmung der kritischen Hoppingparameters sind die weiteren Abschnitte dieses Kapitels gewidmet.

4.2 Bestimmung der Lage des Phasenüberganges

Wie schon in der Einleitung dieses Kapitels geschrieben, ist für die Messung der Eigenschaften des Phasenübergangs eine genaue Kenntnis seiner Lage notwendig. Wie die späteren Simulationsergebnisse zeigen, ist die benötigte Genauigkeit in einer perturbativen 1-Schleifen-Rechnung aber nicht zu erreichen, so daß die Lage des Phasenübergangs im Raum der nackten Parameter durch Simulationen bestimmt werden muß. In Tabelle 2 aus [19] werden Resultate für den kritischen Wert des Hoppingparameters in 1-Schleifen-Gitterstörungstheorie angegeben.

Die Lage eines Phasenübergangs erster Ordnung im Parameterraum läßt sich in numerischen Simulationen aus der Varianz $\mathrm{Var}(\eta)$ eines Ordnungsparameters η bzw. dem Binder-Kumulanten $B(\eta)$ bestimmen

$$\mathrm{Var}^2(\eta) := \langle \eta^2 \rangle - \langle \eta \rangle^2\,,$$

$$B(\eta) := 1 - \frac{\langle \eta^4 \rangle}{3\langle \eta^2 \rangle^2}\,. \tag{4.6}$$

Dies wird in den Referenzen [47, 48] im Rahmen von Potts-Modellen diskutiert. $\mathrm{Var}^2(\eta)$ nimmt am kritischen Punkt ein Maximum und $B(\eta)$ ein Minimum an. Beide Größen zeigen in Potts-Modellen eine starke Volumenabhängigkeit, so daß in [48] noch zwei weitere Verfahren zur Bestimmung des Übergangspunktes diskutiert werden, die eine deutlich geringere Volumenabhängigkeit zeigen. Zum einen

wird

$$N(V_1, V_2, \beta_{\rm pm}) := \left[\frac{Z(V_1, \beta_{\rm pm})^{\frac{V_2}{V_1}}}{Z(V_2, \beta_{\rm pm})} \right]^{\frac{V_1}{V_2 - V_1}} \qquad (4.7)$$

betrachtet. Dazu wird die Zustandssumme Z auf zwei verschiedenen Volumina $V_1 \neq V_2$ bestimmt. Mit $\beta_{\rm pm}$ wird hier die Kopplung im Potts-Modell bezeichnet. Für $V_1, V_2 \to \infty$ gibt $N(V_1, V_2, \beta_{\rm pm})$ die Anzahl der stabilen Phasen an, und der kritische Wert von $\beta_{\rm pm}$ wird durch das Maximum von $N(V_1, V_2, \beta_{\rm pm})$ gegeben. Durch die Quotientenbildung in Gl. (4.7) wird die Volumenabhängigkeit der so erhaltenen kritischen Kopplung deutlich reduziert.

Zum anderen wird das Verhältnis $R(V, \beta_{\rm pm})$ der Wahrscheinlichkeiten $p_{\rm ord}$ und $p_{\rm diss}$ für das Auftreten der geordneten bzw. ungeordneten Phase betrachtet:

$$R(V, \beta_{\rm pm}) := \frac{p_{\rm ord}}{p_{\rm diss}} \,. \qquad (4.8)$$

Die Lage des Übergangspunktes bestimmt sich dann aus der Bedingung

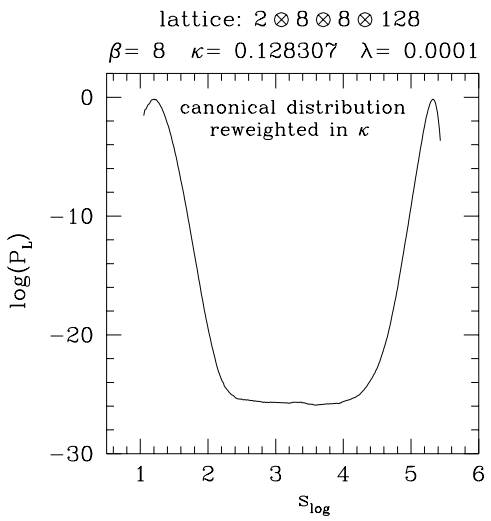
$$R(V, \beta_{\rm pm}) = \frac{\#\text{ geordneten Phasen}}{\#\text{ ungeordneten Phasen}} \,. \qquad (4.9)$$

Der Einfluß des endlichen Volumens auf den Übergangspunkt wird in den genannten Referenzen auf (hyper)kubischen Gittern diskutiert. Die nach Gl. (4.9) bestimmten kritischen Kopplungen zeigen die geringste Empfindlichkeit auf das endliche Volumen.

Wird das Simulationsvolumen hinreichend groß gewählt, so entwickeln sich im Histogramm eines Ordnungsparameters Spitzen, die die verschiedenen (meta)stabilen Phasen repräsentieren, ein Beispiel hierfür wird in Abbildung 4.1 angegeben. Die Lage des kritischen Punktes kann hieraus durch die Forderung nach gleicher Höhe oder gleichem Volumen der Spitzen, bestimmt werden. Das zweite Kriterium ist letztendlich eine Umformulierung der Bedingung in Gl. (4.9). Bei geeigneter Wahl der Gitterausdehnungen ergibt sich im Histogramm ein langgestrecktes, flaches Mittelstück. Die Forderung nach einem waagerechten Verlauf des Mittelstücks bietet eine dritte Möglichkeit den Wert der kritischen Parameter aus dem Histogramm zu bestimmen. Dieses letzte Kriterium liegt der im Abschnitt 4.5 vorgestellten Methode zur Bestimmung des kritischen Punktes zugrunde.

In [19, 49, 20] wird die Lage des Übergangspunktes im SU(2)-Higgs-Modell aus der Forderung nach gleicher Höhe der Spitzen im Histogramm des Ordnungparameters $s_{\log}$ bestimmt. Die Größe $s_{\log}$ wird in (4.11) definiert. In den beiden erstgenannten Referenzen wird darüber hinaus bemerkt, daß mit der Forderung nach gleichem Volumen der Spitzen im $s_{\log}$-Histogramm kompatible Resultate erhalten werden.

Abbildung 4.1: *Histogramm zur Bestimmung des kritischen Punktes und der Oberflächenspannung aus [19].*



Bei allen bislang beschriebenen Verfahren ist es notwendig, daß das System im Verlauf der Simulation häufig zwischen den verschiedenen Phasen wechselt. Ist die Tunnelrate sehr gering, so läßt sie sich durch die Verwendung einer multikanonischen Simulation erhöhen. Dies ist in [19, 49] für die Bestimmung des Histogramms benutzt worden. Zur weiteren Reduktion der Autokorrelation der Konfigurationen wurden verschiedene Teile des Histogramms separat simuliert und anschließend das ge-

sammte Histogramm aus den Teilen rekonstruiert. Trotz dieser Verbesserungen wurde sehr viel Rechenzeit benötigt, um ein aussagekräftiges Histogramm zu erzeugen.

In den nächsten Abschnitten wird deshalb detailliert beschrieben, wie eine verläßliche Abschätzung des Übergangspunktes in verhältnismäßig kurzer Rechenzeit erhalten werden kann. Dazu wird durch äußere Bedingungen mindestens ein Grenzflächenpaar im Simulationsvolumen erzwungen, so daß Teilvolumina verschiedener Phasen in thermischem Kontakt zueinander stehen und kein Übergang von der einen in die andere Phase abzuwarten ist.

4.3 Hysterese

In der experimentellen Untersuchung eines Phasenübergangs erster Ordnung ist in der Regel Metastabilität zu beobachten. Wird das System durch die Veränderung eines *Streßparameters* von einer Phase in die andere überführt, so verbleibt das System bei geeigneten Versuchsbedingungen nach Überqueren des kritischen Punktes in der ursprünglichen Phase und springt erst dann in die andere Phase, wenn der Streßparameter den kritischen Wert deutlich überschritten hat. Als Streßparameter kann im Fall des elektroschwachen Phasenübergangs die Temperatur gewählt werden.

Bei Verwendung lokaler Algorithmen* läßt sich auch in numerischen Gittersimulationen Metastabilität beobachten. Ein Beispiel wird in der Abbildung 4.2 gegeben. Dabei wurde der Hoppingparameter als Streßparameter gewählt. Der eingetragene Wert für den kritischen Hoppingparameter ist den Referenzen [19, 49] entnommen und wurde aus dem Histogramm einer multikanonischen Simulation bestimmt. Die Aufnahme derartiger Hysteresekurven erweist sich besonders dann als sinnvoll, wenn wenig über die Art und Lage des Phasenübergangs bekannt ist. Dabei ist es hier nicht notwendig, die Kurven sehr exakt zu vermessen.

Das Vorhandensein einer Hysterese ist ein wichtiger Hinweis auf einen Phasenübergang erster Ordnung. Aus den Kurven ergibt sich eine erste Abschätzung der Lage des kritischen Punktes im Parameterraum und eine Zuordnung der Meßwerte zu den jeweiligen Phasen. Der letzte Punkt ist unter anderem für die Bestimmung des kritischen Punktes mit der 2-Kopplungs-Methode wichtig, da dort aus den Meßwerten die Phase bestimmt werden muß, in der sich die Konfiguration befindet. Dies wird im Abschnitt 4.4 genauer erläutert.

Wird keine Hysterese beobachtet, so ist dies entweder ein Hinweis darauf, daß es in dem gewählten Parameterbereich keinen Phasenübergang erster Ordnung gibt, oder aber daß das räumliche Volumen zu klein gewählt worden ist, so daß die Tunnelrate zu groß ist. Im letzten Fall sollte die Untersuchung auf einem größeren Gitter wiederholt werden.

In den Untersuchungen mit $\lambda \approx 3 \cdot 10^{-4}$ bzw. $\lambda \approx 5 \cdot 10^{-4}$ sind keine so detailierten Kurven wie in Abb. 4.2 aufgenommen worden. Da dort deutlich größere Volumina notwendig sind, wurden in diesem Fall nur ein oder zwei κ-Werte im offenen Bereich der Hysteresekurven gesucht. Dies hat sich als ausreichend erwiesen.

4.4 2-Kopplungs-Methode

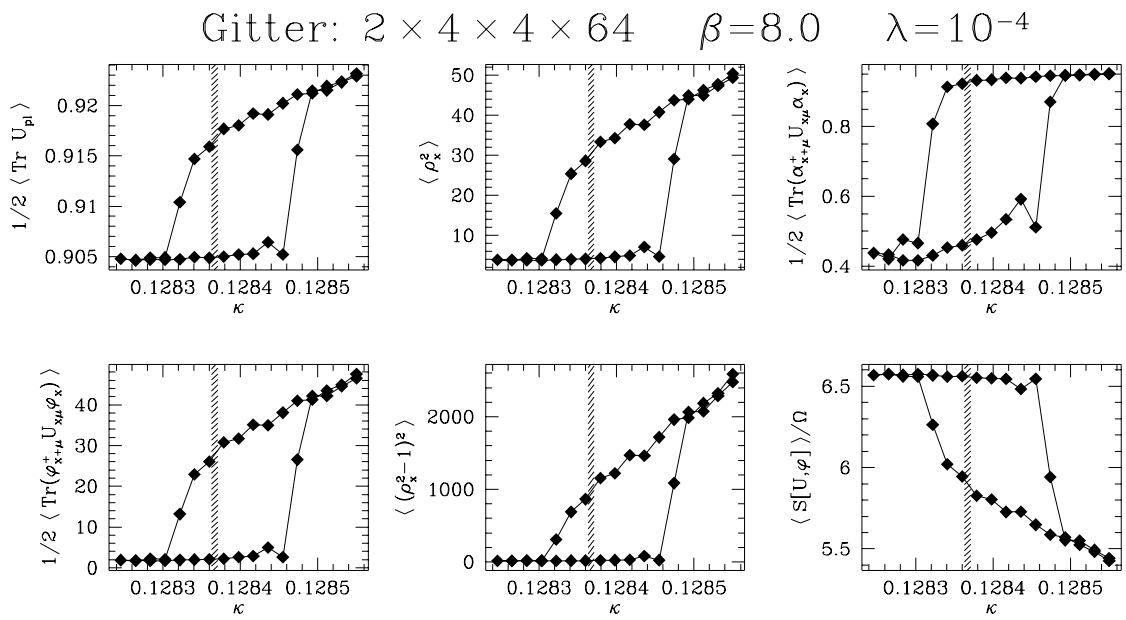
Ist mit Hilfe der Hysteresekurven ein ausreichend großes Gitter bestimmt, so kann mit der 2-Kopplungs-Methode die Lage des kritischen Hoppingparameters κ_c weiter eingeschränkt werden.

Beschreibung der Methode

Zunächst wird das Simulationsvolumen in 2 gleich große Teilvolumina unterteilt, und in den Teilvolumina werden verschiedene Kopplungen, in dieser Untersuchung Hoppingparameter, eingestellt. Wird in einem Teil der Hoppingparameter κ_1 unterhalb und in dem anderen Teil der Parameter κ_2 oberhalb des kritischen Wertes gewählt, so wird eine Konfiguration mit zwei verschiedenen Phasen erzwungen. Durch die periodische Randbedingung des Gitters entstehen dabei zwei Grenzflächen.

*Bemerkung: Bei der Verwendung von Clusteralgorithmen tritt im Isingmodell keine Hysterese auf.

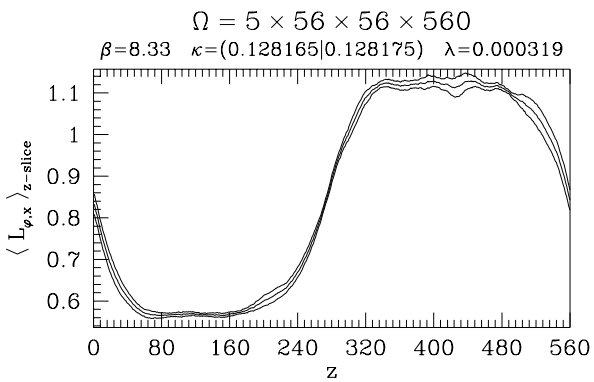
Abbildung 4.2: *Skizzen der Hysteresekurven für 6 verschiedene Größen. Bei jedem κ-Wert werden 100 Sweeps verworfen und 200 Sweeps gemessen. Durch den schraffierten Bereich wird der Meßwert $\kappa_c = 0.128367(4)$ aus [19, 49] angegeben.*



Dieses System wird nun für einige Autokorrelationszeiten simuliert, und es wird kontrolliert, daß in keinem der Teilvolumina ein Phasenwechsel auftritt. Zur Entscheidung, ob sich ein Teilvolumen in der symmetrischen oder der Higgsphase befindet, ist die Information aus den Hysteresekurven nützlich. Das kleinste mögliche $(\kappa_1|\kappa_2)$-Intervall liefert eine untere und obere Schranke für den kritischen Wert $\kappa_1 < \kappa_c < \kappa_2$. Liegt κ_c außerhalb des Intervalls $(\kappa_1|\kappa_2)$, so geht die Konfiguration durch die schon vorhandenen, von außen erzwungenen Phasengrenzflächen schnell in eine Konfiguration mit einer Phase über.

In Abbildung 4.3 wird ein Beispiel eines z-Scheibenprofils gezeigt. Für Gitterpunkte mit z-Koordinate $0 < z \leq 280$ wurde $\kappa_1 = 0.128165$ und für $280 < z \leq 560$ wurde $\kappa_2 = 0.128175$ gewählt. Die extrem lange Gitterausdehnung in z-Richtung $L_z = 560$ trennt die Grenzflächen, und in den Bereichen $80 < z < 160$ und $340 < z < 470$ treten durch die Phasengrenzen wenig beeinflußte reine Phasen auf. Durch Vergrößern von L_z lassen sich sehr kleine Intervalle in κ stabilisieren, da dies den volumenabhängigen Anteil der freien Energie erhöht, ohne den Beitrag der Grenzflächen zu verändern.

Abbildung 4.3: *Profil der z-Scheibenerwartungswerte der Größe $L_{\varphi,x}$ in 2-Kopplungs-Simulation. In der Abbildung ist über 500 Konfigurationen gemittelt worden.*



Resultate der 2-Kopplungs-Methode

Die mit der 2-Kopplungs-Methode erzielten Resultate sind in der Tabelle 4.1 eingetragen. Resultate mit $\kappa_2 - \kappa_1 < 10^{-5}$ wurden mit 64-Bit-Arithmetik bestimmt. Es bleibt anzumerken, daß der Wert $\kappa_c = 0.12836(3)$ in der ersten Zeile der Tabelle innerhalb des offenen Bereichs der Hysteresekurven in Abbildung 4.2 liegt.

4.5 Simulation mit beschränktem Ordnungsparameter

Eine genauere Bestimmung des kritischen Hoppingparameters κ_c läßt sich durch die Beschränkung eines Ordnungsparameters auf den flachen Bereich des Histogramms erreichen.

Beschreibung der Methode

In Simulationen in der Nähe des kritischen Punktes ergibt sich im Histogramm eines Ordnungsparameters η zwischen den Spitzen, die den reinen Phasen entsprechen, ein linearer Bereich, wie in der Abbildung 4.1 deutlich zu sehen ist. Dieser Bereich entsteht dadurch, daß sich ein Teilvolumen des Systems in der Higgsphase und ein anderers in der symmetrischen Phase befindet. Zwischen diesen Teilbereichen bilden sich Grenzflächen aus, die sich während der Simulation verschieben, was zu einer entsprechenden Änderung des Ordnungsparameters η führt. Wird das Gittervolumen geeignet gewählt, so können sich zwischen den Grenzflächen Bereiche mit einer „reinen“ Phase ausbilden. In diesem Fall führt eine Verschiebung der Grenzflächen zu einer Vergrößerung des Volumens der einen und einer Verringerung des Volumens der anderen Phase. Der lineare Bereich des Histogramms endet, wenn sich die Grenzflächen berühren, es gibt dann nur noch einen Bereich, der als reine Phase angesehen werden kann. Am kritischen Punkt sind die Wahrscheinlichkeiten für die Higgsphase und die symmetrische Phase gleich, so daß alle Konfigurationen mit deutlich getrennten Grenzflächen die gleiche Wahrscheinlichkeit haben, und der lineare Bereich im Histogramm waagerecht verläuft.

Durch Modifikationen der Algorithmen werden nur noch Konfigurationen im flachen Bereich des Histogramms erzeugt. Dazu wird eine untere Schranke η_- und eine obere η_+ für den Ordnungsparameter gewählt, und der Bolzmann-Faktor $\exp(-S[U,\varphi])$ wird durch

$$\mathrm{e}^{-S[U,\varphi]} \;\mapsto\; \theta(\eta[U,\varphi]-\eta_-)\,\theta(\eta_+-\eta[U,\varphi])\,\mathrm{e}^{-S[U,\varphi]} \tag{4.10}$$

ersetzt, wobei $\theta(\eta)$ die Heavisidesche Sprungfunktion bezeichnet. Die Implementation der Sprungfunktionen in den Programmtext ist einfach und wird in einem zusätzlichen Metropolis-Schritt realisiert. Vorschläge für den neuen Wert einer Feldvariablen, die zu η-Werten außerhalb des Intervalls $[\eta_-,\eta_+]$ führen werden nicht akzeptiert. Dies kann weder vektorisiert noch parallel durchgeführt werden und führt daher zu einer Verlangsamung der modifizierten Algorithmen.

In den Simulationen wurde für η die Dichte $s_{\log}$ verwendet

$$s_{\log} := \frac{1}{\Omega} S_{\log} := \frac{1}{\Omega}\Big\{ S[U,\varphi] - \langle\, 3\log(\rho_x)\,\rangle \Big\}. \tag{4.11}$$

Die Spiegelungsalgorithmen für die Variablen $U_{x\mu}$ und ρ_x lassen $s_{\log}$ invariant, so daß nur der Spiegelungsalgorithmus für φ_x und die Wärmebadalgorithmen zu verändern sind.

Im Rahmen dieses Projektes konnte der Zusammenhang zwischen der Größe des Intervalls $[s_{\log,-}, s_{\log,+}]$ und der Autokorrelation nicht untersucht werden. Am kritischen Punkt wird die Verschiebung der Grenzflächen durch eine Zufallsbewegung† beschrieben, so daß sofort klar ist, daß für sehr große Intervalle die Autokorrelation mit der Intervallgröße ansteigt. Bei Versuchen mit extrem kleinen Intervallen wurden aber ebenfalls sehr große Autokorrelationszeiten beobachtet, die sich durch eine Vergrößerung des Intervalls reduzieren ließen.

Für die Anwendung dieses Verfahrens ist es notwendig, als Startwert $\kappa_{c,\mathrm{in}}$ eine gute Abschätzung

†engl.: random walk

des kritischen Wertes zu haben. In dieser Untersuchung ist der Startwert in vorhergehenden Simulationen mit der 2-Kopplungs-Methode bestimmt worden. Der Wahl des Intervalls $[s_{\log,-}, s_{\log,+}]$ sollten kurze Simulationen bei $\kappa_{c,\mathrm{in}}$ in der symmetrischen bzw. der Higgsphase zur Ermittelung der ungefähren Lage der Spitzen im Histogramm vorausgehen. Der Wert κ_c, für den sich ein flaches Histogramm ergibt, kann dann durch Gewichtung gewonnen werden, wie im Abschnitt 3.5 erläutert. Als Bedingung für ein flaches Histogramm wird die Beziehung

$$\langle s_{\log} \rangle|_{\kappa=\kappa_c} = s_{\log,\mathrm{m}} \tag{4.12}$$

mit

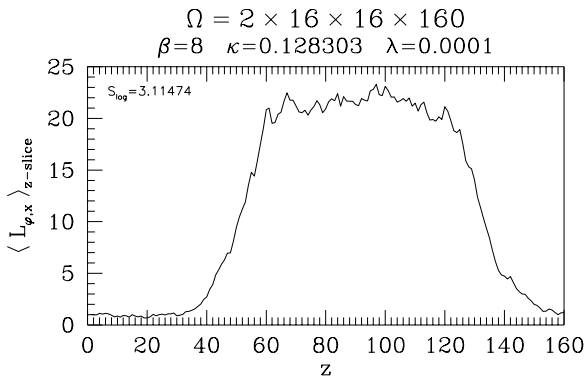
$$s_{\log,\mathrm{m}} := \tfrac{1}{2}(s_{\log,-} + s_{\log,+})$$

benutzt. Durch diese Beziehung wird κ_c implizit angegeben. Die Gleichung (4.12) bietet darüberhinaus eine einfache Möglichkeit, einen statistischen Fehler für κ_c aus dem von $s_{\log}$ zu bestimmen. Wird die Beziehung für die untere bzw. obere Grenze des Fehlerintervalls von $s_{\log}$ gefordert, so ergibt sich eine obere bzw. untere Fehlerschranke für κ_c.

Als Kontrolle dafür, daß wirklich im flachen Bereich des Histogramms simuliert worden ist, wird die gesamte Auswertung zweimal wiederholt. Dabei werden nur die Meßwerte berücksichtigt, die im Intervall $[s_{\log,-}, s_{\log,\mathrm{m}}]$ bzw. $[s_{\log,\mathrm{m}}, s_{\log,+}]$, also in der unteren bzw. oberen Hälfte des Intervalls $[s_{\log,-}, s_{\log,+}]$, liegen. Hierbei ist die Gl. (4.12) entsprechend den eingeschränkten Intervallgrenzen zu verändern. Die drei auf diese Weise erhaltenen Werte für κ_c sollten miteinander verträglich sein. Die Werte, die in den Teilintervallen gewonnen werden, haben aber größere statistische Fehler.

Während der Simulation ist weiterhin zu kontrollieren, daß sich in der Konfiguration zwei Bereiche mit einer reinen Phase ausbilden, die durch Grenzflächen getrennt sind. Dazu wurde in Abständen von ca. 1000 Sweeps das z-Scheibenprofil der Meßgröße $L_{\varphi,x}$ betrachtet, siehe Abb. 4.4. Durch die spezielle Wahl der Gittergeometrie, $L_z \gg L_x, L_y, L_t$, sind nur Grenzflächen senkrecht zur z-Richtung wahrscheinlich. Das Verfahren wurde auf verschiedenen Volumina für die Parameter der **l**- und **m**-Reihe angewandt. Im folgenden werden die Gitterausdehnungen mit $L_t \times L_s \times L_s \times L_z$ bezeichnet.

Abbildung 4.4: *Profil der z-Scheibenerwartungswerte einer typischen Konfiguration bei beschränktem Ordnungsparameter.*



Numerische Resultate

Die auf diese Weise gewonnenen Resultate sind zusammen mit den Simulationsparametern in Tab. 4.2 wiedergegeben. Die erste und die dritte Zeile der Tabelle stellen eine wichtige Kontrolle der Methode dar. In [19, 49] wird mit Hilfe des Histogrammverfahrens bei den gleichen Parametern β und λ auf Gittern der Größe $2\times4\times4\times128$ und $2\times8\times8\times128$ der Wert des kritischen Hoppingparameter zu $\kappa_c = 0.128366(1+3)$ bzw. $\kappa_c = 0.128307(1+2)$ bestimmt, wobei der erste Wert in der Klammer den statistischen Fehler und der zweite eine Abschätzung des systematischen Fehlers angibt. Diese kritischen Werte stimmen gut mit den entsprechenden Werten der Tabelle überein.

In den folgenden drei Zeilen wurde das räumliche Volumen vergrößert. Im Vergleich zum kritischen Hoppingparameter bei $L_s = 8$ ergibt sich eine signifikante Verschiebung, aber zwischen den Werten bei $L_s = 12$ und $L_s = 16$ kann keine Abweichung festgestellt mehr werden. Die größere Genauigkeit des Wertes bei $L_s = 16$ im Vergleich zum Meßwert bei $L_s = 12$ ergibt sich unter anderem durch den Austausch des Spiegelungsalgorithmuses für ρ_x durch

Tabelle 4.1: *Werte des kritischen Hoppingparameters aus der 2-Kopplungsmethode*

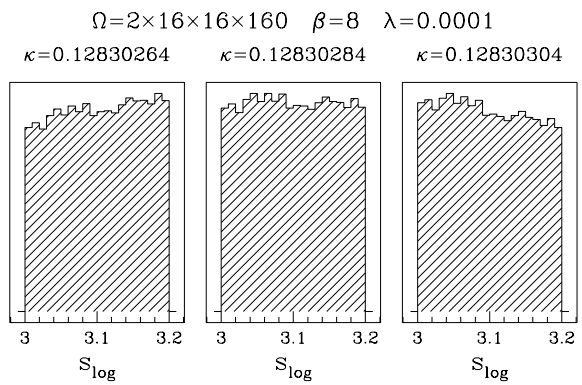
Gitter Ω	β	λ	κ_c
$2\times\ 4\times\ 4\times 128$	8.00	0.00010	0.12836(3)
$3\times\ 6\times\ 6\times 192$	8.15	0.00011	0.12813(2)
$3\times 12\times 12\times 192$	8.15	0.00011	0.128112(5)
$3\times 24\times 24\times 192$	8.15	0.00011	0.128110(3)
$2\times 20\times 20\times 256$	8.00	0.00030	0.12865(1)
$3\times 32\times 32\times 512$	8.15	0.00031	0.128355(5)
$4\times 44\times 44\times 512$	8.25	0.000315	0.128235(5)
$5\times 56\times 56\times 560$	8.33	0.000319	0.128170(5)
$3\times 48\times 48\times 384$	8.15	0.00051	0.12852(2)

Tabelle 4.2: *Resultate der Simulation mit beschränktem Ordnungsparameter*

Gitter Ω	β	λ	$[s_{\log,-}, s_{\log,+}]$	Sweeps	κ_c
$2\times\ 4\times\ 4\times 192$	8.00	0.00010	[3.00,3.20]	50000	0.1283645(7)
$2\times\ 6\times\ 6\times 192$	8.00	0.00010	[3.00,3.20]	40000	0.1283160(5)
$2\times\ 8\times\ 8\times 128$	8.00	0.00010	[3.00,3.20]	105000	0.1283058(5)
$2\times 10\times 10\times 192$	8.00	0.00010	[3.00,3.20]	40000	0.12830398(30)
$2\times 12\times 12\times 192$	8.00	0.00010	[3.00,3.20]	50000	0.1283028(4)
$2\times 16\times 16\times 160$	8.00	0.00010	[3.00,3.20]	49000	0.12830284(20)
$3\times 12\times 12\times 192$	8.15	0.00011	[4.05,4.25]	28000	0.1281130(6)
$2\times 24\times 24\times 256$	8.00	0.00030	[4.90,4.95]	18000	0.1286565(7)

den für φ_x. Die integrierte Autokorrelationszeit $\tau_{\rm int}$ der Meßgrößen $L_{\varphi,x}$ und $S_{\log}$ verringert sich dabei um einen Faktor 3, gemessen in Sweeps. In Abb. 4.5 wird die Sensitivität der Histogramme auf Veränderung des Hoppingparameters gezeigt.

Abbildung 4.5: *Veränderung der Histogramme mit beschränktem Ordnungsparameter bei Verschiebung des Hoppingparameters um eine Standardabweichung. Die Auswertung ergibt* $\kappa_c = 0.12830284(20)$.



In der Referenz [20] ist eine Meßreihe mit kritischen Hoppingparametern für $\beta = 8.0$ und $\lambda = 0.0003$ veröffentlicht und für das größte dort untersuchte Gitter $2{\times}16{\times}16{\times}256$ ein Wert $\kappa_c = 0.128658(1)$ angegeben. Dieser Wert wurde aus dem Histogramm der Größe $s_{\log}$ mit der Forderung nach gleicher Höhe der Spitzen bestimmt und er stimmt mit dem letzten Wert in der Tabelle 4.2 gut überein.

4.6 Phasenübergang im endlichen Volumen

Wie schon im Abschnitt 4.2 beschrieben, ist die Lage des Phasenübergangs im Parameterraum vom betrachteten Simulationsvolumen und der Bestimmungsmethode abhängig. Aus den Daten der Tabelle 4.2 soll hier das Verhalten der in den Simulationen mit beschränktem Ordnungsparameter erhaltenen kritischen Hoppingparameter unter Veränderung des räumlichen Volumens untersucht werden.

Für die Anwendung dieser Methode ist es notwendig, daß eine Gitterausdehnung, hier in z-Richtung, sehr groß im Vergleich zu den anderen Ausdehnungen ist. In [20] wird auf einem derartigen Gitter der kritische Wert des Hoppingparameters durch die Forderung nach gleicher Höhe der Spitzen des Histogramms bestimmt. Im Rahmen der dort erreichten Genauigkeit (Fehler$(\kappa_c)/\kappa_c = \mathcal{O}(10^{-6})$) kann keine Abhängigkeit der Werte des kritischen Hoppingparameters von der z-Ausdehnung des Gitters für $L_z \geq 8 \cdot L_s$ festgestellt werden. Wird nun angenommen, daß der Einfluß von L_z auch hier deutlich geringer als der statistische Fehler ist, ist hier nur die Abhängigkeit des Wertes des kritischen Hoppingparameters von L_s von Interesse. Da $L_t = [a\,T_c]^{-1}$ gilt, ist die Länge L_t zu den Kopplungen zu zählen.

In [19] wird die Frage des Einflusses des Volumens auf den kritischen Hoppingparameter des SU(2)-Higgs-Modells in Gitterstörungstheorie untersucht. Bei festem L_t ergeben sich Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}([L_s^2\,L_t]^{-1})$. Dabei wurde ein Verhältnis $L_z \approx 3L_s$ benutzt, in Tabelle 4.2 gilt aber $L_z \geq 10L_s$, so daß sich hier die Frage neu stellt.

Das Verhalten von Potts-Modellen auf Gittern der Form $L_s \times L_s \times \ldots \times L_s \times L_z$ mit $L_z \gg L_s$ wird in [50] diskutiert. Für das aymptotische Verhalten der kritischen Kopplung $\beta_{\rm pm,c}(L_s)$ ergibt sich für $L_z \to \infty$

$$\beta_{\rm pm,c}(L_s) - \beta_{\rm pm,c} \;\sim\; K \exp(-L_s/L_0)\,, \qquad (4.13)$$

wobei $\beta_{\rm pm,c}$ den Wert der kritischen Kopplung auf unendlichem Volumen bezeichnet. $L_0 = \max\{\xi_{\rm o}, \xi_{\rm d}\}$ gibt dabei das Maximum der Korrelationslänge am Phasenübergang an, und K ist eine positive Konstante. Hierdurch motiviert, wird versucht, das Verhalten der kritischen Hoppingparameterwerte als Funktion von L_s durch den Ansatz

$$\kappa_{c,\exp}(L_s) = \kappa_c(\infty) + c_1 \exp(-c_2 L_s) \qquad (4.14)$$

zu beschreiben. Auf einem kubischem Volumen $V = L_s^d$, wobei d für die Anzahl der Dimensionen steht, ergibt sich dagegen ein Verhalten $\kappa_c(L_s) = \kappa_c(\infty) +$

$c_1 V^{-1}$. Aus diesem Grund soll hier auch der Ansatz

$$\kappa_{c,\mathrm{p}}(L_s) = \kappa_c(\infty) + c_1 L_s^{-c_2} \qquad (4.15)$$

betrachtet werden. Beide Ansätze besitzen drei Parameter. Die mit diesen Ansätzen erhaltenen Fits sind in der Abbildung 4.6 wiedergegeben. Dabei wurden alle Datenpunkte der Tabelle 4.2 der Meßreihe einbezogen. Da das χ^2 für den Ansatz (4.15) etwas zu groß ist, wurden die Fits unter Auslassung des Wertes $L_s = 4$ wiederholt. Die Parameter und die Schwankungsquadrate der Fits können der Tabelle 4.3 entnommen werden. Zur Bestimmung der statistischen Fehler wurde die Auswertung mit normalverteilten Werten für die kritischen Hoppingparameter $\kappa_c(L_s)$ wiederholt. Für $L_s \geq 6$ ergeben sich keine signifikant von Null verschiedenen Werte für den Koeffizienten c_1. Die χ^2-Werte des Exponentialansatzes $\kappa_{c\,\exp}$ sind in beiden Fällen sehr gut. Weiterhin ist dieser Fit sogar dann stabil wenn der Wert $L_s = 16$ aus der Auswertung entfernt wird.

Wenn alle Daten in die Auswertung einbezogen werden, ergibt sich zwischen den Ansätzen eine deutliche Abweichung von mehr als drei Standardabweichungen für die Extrapolation des kritischen Hoppingparameters zu $L_s \to \infty$. Wird der Wert bei $L_s = 4$ aus der Auswertung herausgenommen, so ergeben sich aus beiden Ansätzen verträgliche Werte für $\kappa_c(\infty)$. In diesem Fall vergrößert sich der Wert des Laurentansatzes (4.15) deutlich, das Resultat des Exponentialansatzes bleibt dagegen weitgehend unverändert. Die zuletzt genannten Werte stimmen im Rahmen der Fehler mit den gemessenen Resultaten bei $L_s = 12$ und 16 überein. Diese Beobachtung rechtfertigt es, für praktische Untersuchungen κ_c auf großem Gitter zu messen und diesen Wert, wenn er sich bei weiterer Vergrößerung des Volumens nicht mehr ändert, als Wert für unendliches Volumen anzusehen.

Der gemessene Wert des Koeffizienten c_2 des Ansatzes (4.14) ist von der gleichen Größenordnung wie die Masse m_W des W-Bosons bei $T = T_c$. Dies ergibt sich aus einem Vergleich mit den Werten der Tabelle 6 aus [19]. Die Masse des Higgsbosons in der Higgsphase bei $T = T_c$ führt aber zu einer deutlich größeren Korrelationslänge, so daß die Beziehung $c_2^{-1} = \max(\xi_{\mathrm{Higgs}}, \xi_{\mathrm{sym}})$ entsprechend [50] hier nicht erfüllt ist.

Sollte der Ansatz (4.15) bei präziseren Daten dennoch die bessere Beschreibung des untersuchten Verhaltens liefern, so legen die gemessenen Werte des Exponenten Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(V^{-2})$, d.h. $c_2 = 4$ nahe. Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(V^{-2})$ wurden in [51] für das Maximum der Suszeptibilität der Magnetisierung des dort untersuchten Spinmodells berichtet.

Der Ansatz (4.14) wird von den gemessenen Daten deutlich bevorzugt, der gesamte Bereich $4 \leq L_s \leq 16$ kann durch diesen Ansatz gut beschrieben werden. Aus de vorhandenen Meßdaten kann ein führender Korrekturterm $\mathcal{O}(V^{-1})$ ausgeschlossen werden.

Abbildung 4.6: *Verschiebung des kritischen Hoppingparameters bei Vergrößerung des räumlichen Volumens. Die eingetragenen Meßwerte wurden in Simulationen mit beschränktem Ordnungsparameter erhalten. Aus methodischen Gründen wurden jeweils Gitter der Form $\Omega = 2 \times L_s \times L_s \times L_z$ mit $L_z \geq 10 \cdot L_s$ benutzt.*

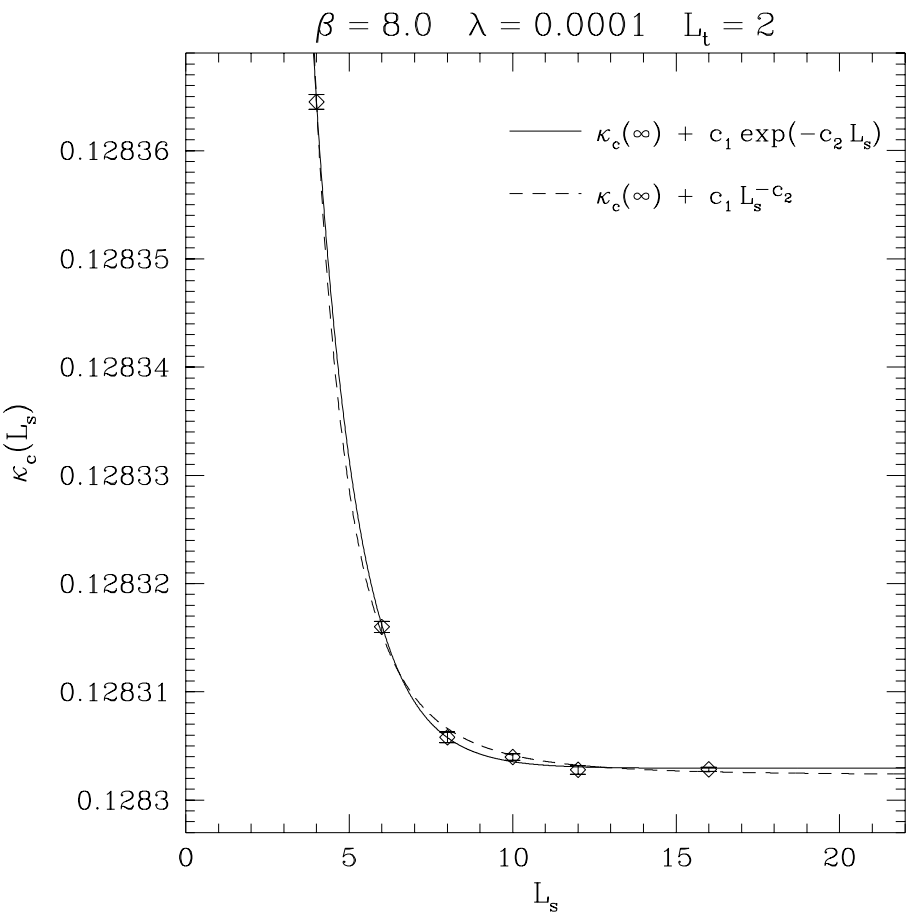


Tabelle 4.3: *Extrapolation des kritischen Hoppingparameters mit den Ansätzen (4.14) und (4.15) zu $L_s \to \infty$.*

Ansatz	L_s	$\kappa_c(\infty)$	c_1	c_2	χ^2
$\kappa_{c,\exp}$	$4 \leq L_s \leq 16$	0.12830294(16)	0.00133(11)	0.769(20)	2.9
	$6 \leq L_s \leq 16$	0.12830284(19)	0.0008(8)	0.69(8)	1.9
$\kappa_{c,\mathrm{p}}$	$4 \leq L_s \leq 16$	0.12830232(19)	0.0130(18)	3.85(10)	7.0
	$6 \leq L_s \leq 16$	0.12830271(22)	0.1(6)	4.9(6)	1.3

Kapitel 5

Renormierte Massen und Kopplungen

Der Bestimmung der renormierten Massen und Kopplungen kommt eine zentrale Bedeutung in der Untersuchung zu. Der Wert der Gitterkonstanten a wird durch den Vergleich der gemessenen W-Bosonmasse (in Gittereinheiten) mit dem physikalischen Wert $M_W \approx 80$ GeV bestimmt. Im Abschnitt 4.1 wurden die *Kurven konstanter Physik* diskutiert, dabei sind die nackten Parameter so zu wählen, daß die renormierten Kopplungen bei Veränderung der Gitterkonstanten a unverändert bleiben. Anhand der Simulationsergebnisse ist zu kontrollieren ob dieses Ziel auch wirklich erreicht wird.

5.1 Massen bei $T = 0$

In diesem Abschnitt wird die Bestimmung der Massen des Higgs- und des W-Bosons in der Higgsphase bei Temperatur $T = 0$ beschrieben. Aus den Ergebnissen wird der Wert der Gitterkonstanten in physikalischen Einheiten und das Verhältnis $R_{HW} := M_H/M_W$ bestimmt. Das Massenverhältnis ist über die Beziehung

$$R_{HW}^2 = \frac{32\lambda_R}{g_R^2} \tag{5.1}$$

mit der renormierten quartischen Selbstkopplung λ_R verbunden, g_R bezeichnet dabei die renormierte Eichkopplung, die im Abschnitt 5.2 diskutiert wird.

Korrelationsfunktionen

Die renormierten Massen werden wie üblich aus dem Abfall verbundener Korrelationsfunktionen bestimmt. Wird die verbundene Korrelationsfunktion $\Gamma_{\mathcal{B}}(t) := \langle \mathcal{B}_t \mathcal{B}_0 \rangle_c$ des zeitabhängigen Operators $\mathcal{B}_t$ mit $\langle i|\mathcal{B}_0|i\rangle \neq 0$ auf einem Gitter mit Zeitausdehnung L_t betrachtet, so ergeben sich t-unabhängige Beiträge, die für $L_t \to \infty$ verschwinden. Hier bezeichnet $|i\rangle$ die Eigenzustände des Hamiltonoperators. Wie in [52] für das Ising-Modell diskutiert, ergibt sich der dominante t-unabhängige Beitrag zu:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathcal{B}}(t) &= |\langle 0|\mathcal{B}_0|0\rangle - \langle 1|\mathcal{B}_0|1\rangle|^2 \exp(-E_1 L_t) \\ &\quad + \ldots + t\text{-abhängig}\,. \end{aligned} \tag{5.2}$$

Dies ist bei der Bestimmung der Higgsbosonmassen zu berücksichtigen.

Die Benutzung von Zeitscheibenmittelwerten für $\mathcal{B}_t$ führt zu einer Projektion auf Zustände mit räumlichem Impuls $\vec{p} = 0$. Die Higgsbosonmasse M_H wird aus den Zeitscheibenmittelwerten der Operatoren ρ_x^2, $L_{\varphi,x\mu}$ und $L_{\alpha,x\mu}$ und die W-Bosonmasse M_W aus den Zeitscheibenmittelwerten der Operatoren

$$W_{x,rk} := \tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}(\tau_r \alpha^+_{x+\hat{k}} U_{xk} \alpha_x)\,, \qquad r,k \in \{1,2,3\} \tag{5.3}$$

ermittelt. Aufgrund der Isospin- und der Rotationsinvarianz können die Korrelationsfunktionen der $W_{x,rk}$-Zeitscheibenerwartungswerte über r und k gemittelt werden, und wegen $\langle i|W_{x,rk}|i\rangle = 0$ tritt in den Korrelationsfunktionen zur Bestimmung der W-Bosonenmasse kein konstanter Term auf.

Die Higgsbosonmassen werden mit einem dreiparametrigen Ansatz (cosh+Konstante) gefittet, für die Bestimmung von M_W wird keine Konstante benutzt. Zunächst wird mit den im Abschnitt 3.4 be-

schriebenen Methoden das optimale Fitintervall bestimmt. Dazu wird das größte Intervall gewählt, für das χ^2/Fgd. ≈ 1 gilt. Dies wird in [21] detailiert beschrieben. Mit Fgd. wird die Anzahl der Freiheitsgrade abgekürzt. Die Meßwerte für die Massen werden anschließend auf diesen Fitintervallen mit unkorrelierten Fits bestimmt, d.h. dabei werden die Nichtdiagonalelemente der Korrelationsmatrix $C(t,t')$ auf Null gesetzt. Die statistischen Fehler der Massen werden in einer Jackknife-Analyse bestimmt [33, 55].

Messungen

In der **m**-Meßreihe werden die Massen für vier inverse Gitterabstände $a^{-1} \in \{2T_c, \ldots, 5T_c\}$ bestimmt. Bei jedem Wert werden zwei verschiedene Hoppingparameter und für $a^{-1} = 2T_c$ außerdem verschiedene räumliche Volumina untersucht. Die Größen der untersuchten Gitter, die nackten Parameter und die Sweepzahlen werden in der Tabelle A.2 angegeben. In diesen Simulationsläufen werden ebenfalls die Wilson-Schleifen zur Bestimmung der renormierten Eichkopplung gemessen. Natürlich wurden die Größen der feineren Gitter ($a^{-1} \geq 3T_c$) erst nach Abschluß der Messungen bei $a^{-1} = 2T_c$ festgelegt.

In der Tabelle A.3 werden die Resultate für die renormierten Massen M_H und M_W in Einheiten der Gitterkonstante, das Massenverhältnis R_{HW} und die Higgsbosonmasse in GeV angegeben. Die ersten fünf Zeilen der Tabelle geben Resultate für $\kappa = 0.12865$ auf verschiedenen räumlichen Volumina an. Die Resultate sind in Abhängigkeit von der räumlichen Ausdehnung L_s des Volumens in der Abbildung 5.1 graphisch dargestellt. Die Higgsbosonmasse und das Massenverhältnis R_{HW} lassen sich im Bereich von $L_s = 8$ bis 24 bzw. 12 bis 24 sehr gut durch eine Gerade beschreiben. Das Verhalten der W-Bosonmasse kann in dem Bereich von $L_s = 8$ bis 24 durch die Formel

$$M(L_s) \simeq M_\infty [1 - C \exp(-mL_s)], \qquad (5.4)$$

die sich aus Untersuchungen für Skalarfelder [52, 53] motiviert, beschrieben werden. Die Volumenabhängigkeit der Meßwerte ist erstaunlich gering, für $L_s \geq 12$ ist der Einfluß des Volumens dem statistischen Fehler vergleichbar. Die Untersuchung der renormierten Eichkopplung in Abschnitt 5.2 führt zum gleichen Ergebnis, auch dort ist der Einfluß des Volumens für $L_s \geq 12$ sehr klein. Somit ergibt sich für das Verhältnis aus der räumlichen Gitterausdehnung L_s und der Korrelationslänge $\xi_H := M_H^{-1}$ das Resultat $L_s/\xi_H \approx 3$. In den Untersuchungen auf feineren Gittern wird für die räumliche Ausdehnung ein Wert $L_s \geq 6/T_c$ gewählt.*

Für den Einfluß des Hoppingparameters auf die Ergebnisse ergibt sich aus der Tabelle A.3 für alle Gitterkonstanten das gleiche Bild. Für $a^{-1} = 2T_c$ sind hier die Messungen mit den Indizes m2[12/65] und m2[12/70] zu vergleichen. Bei jedem Gitterabstand ist in der jeweils oberen Zeile ein Hoppingparameter $\kappa \approx \kappa_c$ gewählt worden, wogegen in der unteren Zeile ein deutlich größerer Wert benutzt worden ist. Die Werte der Massen verschieben sich sehr deutlich, wenn der Hoppingparameter verändert wird, wohingegen sich für das Massenverhältnis R_{HW} keine signifikante Verschiebung zeigt. Es ergibt sich nicht einmal ein einheitlicher Trend. Bei $a^{-1} = 4T_c$ sinkt R_{HW} mit ansteigendem κ, in den anderen Fällen steigt das Massenverhältnis.

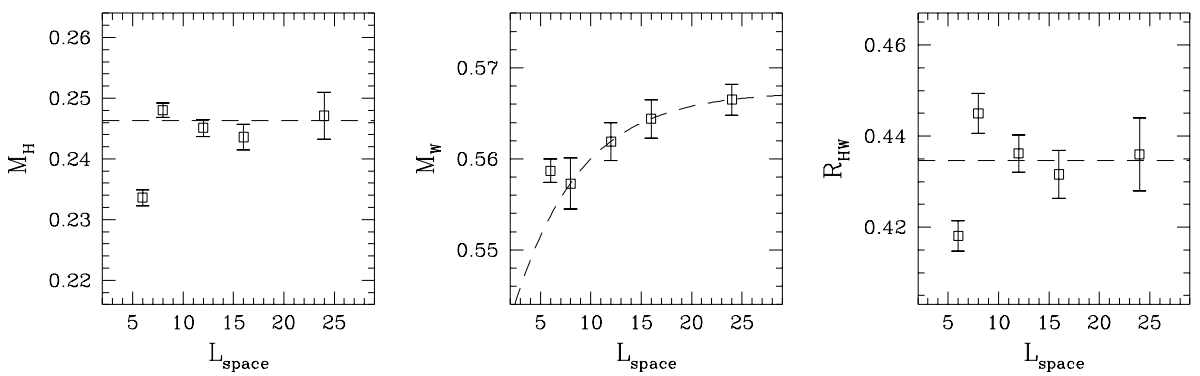
Zum Abschluß dieses Abschnitts ist auf die Kurven konstanter Physik zurückzukommen. Alle gemessenen Werte des Massenverhältnisses sind mit $R_{HW} = 0.422(11)$ verträglich. Auch hier läßt sich nicht einmal ein Trend einer systematischen Zu- oder Abnahme feststellen.

5.2 Renormierte Eichkopplung

Die Bestimmung der renormierten Eichkopplung aus den Wilson-Schleifen wird in den Referenzen [19, 49] ausführlich diskutiert, so daß dies hier nur

*Die Wahl einer größeren Ausdehnungen L_s für $a^{-1} = 3T_c$ ist durch die Topologie der Quadrics-Computer bedingt, siehe Abschnitt 3.1.

Abbildung 5.1: *Volumenabhängigkeit der renormierten Massen und des Massenverhältnisses R_{HW}. Es gilt $\beta = 8.0$, $\kappa = 0.12865$ und $\lambda = 0.0003$. L_s bezeichnet die räumliche Ausdehnung des Simulationsvolumens. Die gestrichelten Kurven entsprechen $M_H = 0.2463$, $M_W = 0.5674[1 - 0.06\exp(-0.1523 L_s)]$ und $R_{HW} = 0.4346$.*



skizziert wird.

Yukawaansatz

Zunächst wird das statische Potential $V(\vec{r})$ aus dem Verhalten der Wilson-Schleifen $W(\vec{r},t)$ für große t bestimmt:

$$V(\vec{r}) = -\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \log W(\vec{r},t) \qquad (5.5)$$

Durch einen Fit der Daten mit einem Yukawaansatz wird die Abschirmmasse M bestimmt, dabei wird entsprechend Ref. [54] ein Term $D \cdot G(M, R, L_s)$ zur Korrektur des Einflusses der Gitterkonstanten und der endlichen räumlichen Gitterausdehnung benutzt

$$V(\vec{r}) = -A \cdot \frac{1}{|\vec{r}|} \mathrm{e}^{-M|\vec{r}|} + C + D \cdot G(M, \vec{r}, L_s)\,, \quad (5.6)$$

mit

$$G(M, \vec{r}, L_s) := \frac{1}{|\vec{r}|} \mathrm{e}^{-M|\vec{r}|} - I(M, \vec{r}, L_s)\,,$$

$$I(M, \vec{r}, L_s) := \frac{4\pi}{L_s^3} \sum_{\vec{k}} \frac{\exp(\mathrm{i}\vec{k}\vec{r})}{M^2 + 4\sum_{i=1}^{3} \sin^2(\frac{1}{2}k_i)}\,,$$

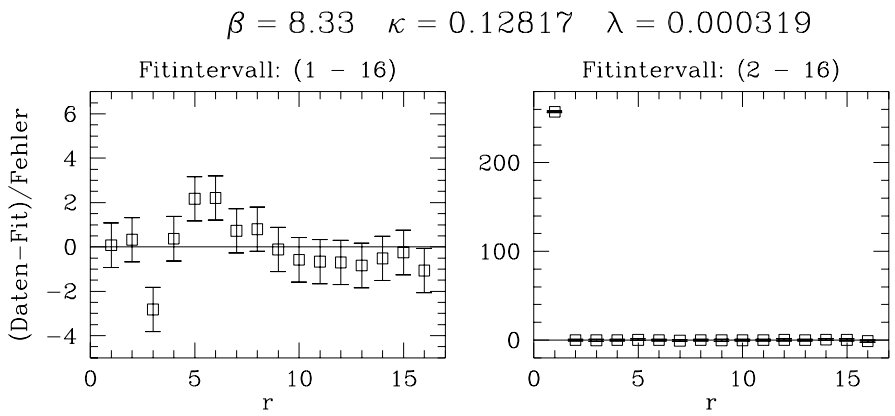
$$k_i := \frac{2\pi n_i}{L_s}\,, \qquad n_i \in \{0, \ldots, L_s - 1\}\,.$$

Aus dem Fitparameter A läßt sich mit der Definition $g_R^2 := \frac{16\pi}{3} A$ eine renormierte Eichkopplung bestimmen. Im Gegensatz zu den in [19] veröffentlichten Untersuchungen der **l**- und **h**-Meßreihen ist in den genaueren Untersuchungen der **m**-Reihe eine deutliche Abweichung der Meßdaten von Ansatz (5.6) festzustellen.

Ein Beispiel wird in Abbildung 5.2 gegeben. Sollen die gemessenen $V(r)$-Daten im Bereich $1 \le r \le 16$ durch den Yukawaansatz (5.6) beschrieben werden, so ergibt sich bei den in der Abbildung angegebenen Parametern $\chi^2 = 22.4$. Dabei wurden nur die Diagonalelemente der Kovarianzmatrix berücksichtigt, die Korrelationen zwischen den Meßwerten bei verschiedenem r wurde nicht betrachtet. Die Vernachlässigung der Nichtdiagonalelemente führt in der Regel zu sehr kleinen χ^2-Werten, so daß nicht auf eine gute Beschreibung der Meßdaten durch den Ansatz (5.6) geschlossen werden kann. Wird hingegen der Datenpunkt bei $r = 1$ ausgelassen, so ergibt sich eine Abweichung dieses Meßpunktes von der Fitkurve von mehr als 200 Standardabweichungen und das Schwankungsquadrat sinkt auf $\chi^2 = 2.1$. Wird auch der Meßpunkt bei $r = 2$ ausgelassen, so ergibt sich keine signifikante Änderung mehr.

Diese Abweichung des Meßwertes bei $r = 1$ vom Ansatz läßt sich in allen Untersuchungen der **m**-Meßreihe mit $a^{-1} > 2T_c$ beobachten, und die festge-

Abbildung 5.2: *Yukawafit entsprechend Gl. (5.6) an das statische Potential $V(r)$. Aufgetragen ist die Abweichung der Meßdaten von der Fitkurve in Einheiten des statistischen Fehlers.*



stellte Abweichung des Meßwertes $V(r=1)$ von der Fitkurve ist in allen Fällen größer als 150 Standardabweichungen. Die resultierenden Fitparameter sind in der Tabelle A.4 angegeben. Die Abschirmmassen M des Potentials stimmen im Rahmen ihrer statistischen Fehler mit den aus den Korrelationsfunktionen bestimmten W-Bosonmassen M_W in Tabelle A.3 überein.

In dem Ansatz (5.6) wird nur der Austausch eines W-Boson berücksichtigt, so daß dieser Effekt durch den Austausch eines zweiten Bosons oder aber auch durch Gitterartefakte verursacht sein kann. Beide Effekte haben bei kleinen Abständen ihre größten Auswirkungen. Eine dritte Erklärungsmöglichkeit ist ein nichtperturbativer Effekt. Eine genauere Untersuchung in zukünftigen Studien ist wünschenswert.

Nach dieser Erfahrung wurden die Daten mit $a^{-1} = 3T_c$ der **l**- und der **h**-Reihe erneut ausgewertet. Dabei konnte diese Abweichung nicht bestätigt werden. Es ergab sich auch keine signifikante Veränderung der Fitparameter, wenn $V(r=1)$ aus der Auswertung herausgenommen wurde. Dies kann durch die deutlich schlechtere Statistik verursacht sein (größere integrierte Autokorrelationszeit aufgrund des langsameren Spiegelungsalgorithmuses für ρ_x).

Lokale Definition der renormierten Eichkopplung

Aufgrund der deutlichen Abweichung des gemessenen Potentials vom Yukawaansatz bei kleinen r-Werten erscheint es wenig sinnvoll, die renormierte Kopplung in der angegebenen Weise aus dem Parameter A des Ansatzes (5.6) zu bestimmen. Statt dessen wird hier im weiteren eine lokale Definition der renormierten Eichkopplung benutzt [54]

$$g_R^2(\tilde{r}) := -\frac{16\pi}{3}\,\frac{V(\vec{r}) - V(\vec{r}-\vec{d})}{I(M,\vec{r},L_s) - I(M,\vec{r}-\vec{d},L_s)}\,. \tag{5.7}$$

Für M wird die mit Hilfe des Yukawaansatzes bestimmte Abschirmmasse benutzt. Der Abstand $\tilde{r}$ bestimmt sich aus der Gleichung

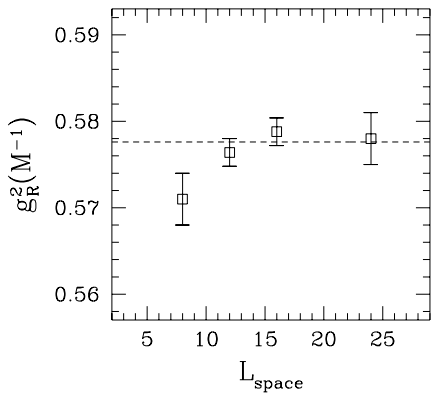
$$-\left(\frac{1}{\tilde{r}^2}+\frac{M}{\tilde{r}}\right)\exp(-M\,\tilde{r}) = \frac{I(M,\vec{r},L_s) - I(M,\vec{r}-\vec{d},L_s)}{|\vec{d}|}\,. \tag{5.8}$$

Dieses Vorgehen wurde in [56] für die reine SU(2)-Eichtheorie vorgeschlagen, durch diese Definition werden die Gitterartefakte im Vergleich zur naiven Wahl $\tilde{r}_{\rm naiv} = |\vec{r} - \frac{1}{2}\vec{d}|$ reduziert (Baumgraphenverbesserung). Die renormierte Eichkopplung wird abschließend zur inversen Abschirmmasse M^{-1} inter-

poliert. Die Resultate für $g_R^2(M^{-1})$ sind ebenfalls in der Tabelle A.4 angegeben.

Für $L_s = 6$ konnte keine renormierte Eichkopplung bestimmt werden, da für den Yukawafit mindestens 4 Parameter benötigt werden. Bei $a^{-1} = 2T_c$ läßt sich auch hier für $L_s \geq 12$ kein signifikanter Einfluß des endlichen Volumens auf die renormierte Kopplung $g_r^2(M^{-1})$ feststellen, siehe Abbildung 5.3.

Abbildung 5.3: *Volumenabhängigkeit der renormierten Eichkopplung bei $\beta = 8.0$, $\kappa = 0.12865$ und $\lambda = 0.0003$. Die gestrichelte Linie gibt den Mittelwert $g_R^2(M^{-1}) = 0.5776$ der Meßwerte mit $L_s \geq 12$ an.*



Wie der Tabelle A.4 zu entnehmen ist, ist bei den auf diese Weise erhaltenen Werten der renormierten Eichkopplung $g_R^2(M^{-1})$ keine Abhängigkeit von der Verschiebung des Hoppingparameters κ und vom Wert der Gitterkonstanten a festzustellen. Alle gemessenen Werte sind mit $g_R^2(M^{-1}) = 0.585(10)$ verträglich.

Da im Abschnitt 5.1 keine signifikante Abhängigkeit des Massenverhältnisses R_{HW} vom Hoppingparameter und vom Gitterabstand zu beobachten war, sind hier drei wichtige Ergebnisse festzuhalten:

1. Der Einfluß des Volumens auf die renormierten Massen und Kopplungen ist gering, im Rahmen der erreichten Genauigkeit ist es ausreichend ein Verhältnis $L_s/\xi_H \approx 3$ zu benutzen.

2. Die Unsicherheit des Hoppingparameters führt zu einer Verschiebung des Wertes der Gitterkonstanten in physikalischen Einheiten, die Werte der renormierten Kopplungen werden durch den Hoppingparameter dagegen nur unwesentlich beeinflußt.

3. Im Rahmen der erreichten Meßgenauigkeit $\mathcal{O}(2\%)$ reicht die Benutzung der Renormierungsgruppengleichungen in 1-Schleifen-Störungstheorie (4.4) und (4.5) aus, um die renormierten Kopplungen bei Veränderung der Gitterkonstanten konstant zu halten.

Die beiden letzten Resultate sind schon aus den Untersuchungen der **l**- und der **h**-Meßreihe in [19] erwartet worden. Dort wurden in beiden Meßreihen die renormierten Massen und Kopplungen für $a^{-1} = 2T_c$ und $3T_c$ gemessen, und in der **h**-Meßreihe wurden bei $a^{-1} = 2T_c$ zwei verschiedene Werte des Hoppingparameters untersucht.

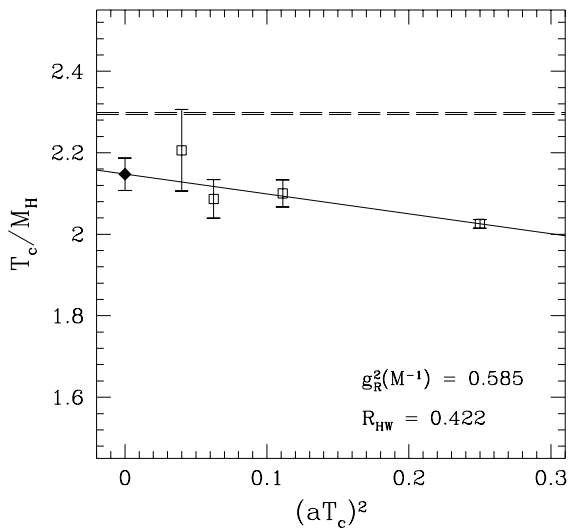
5.3 Kritische Temperatur

In den vorangegangen Abschnitten wurden die renormierte Massen und Kopplungen bestimmt. Das in Kapitel 4 vorgestellte Verfahren zur Bestimmung der nackten Kopplungen hat sich dabei als ausreichend erwiesen, um die renormierten Kopplungen konstant zu halten. Dabei wurde der Wert der kritischen Temperatur T_c in Einheiten der Gitterkonstanten vorgewählt. Mit Hilfe der Meßwerte der renormierten Massen läßt sich die kritische Temperatur in physikalische Einheiten umrechnen. Neben dem statistischen Fehler der Massen ist hierbei auch die Unsicherheit des kritischen Hoppingparameters zu berücksichtigen.

Die kritische Temperatur in Einheiten der Higgsbosonmasse T_c/M_H läßt sich aus den Simulationsergebnissen und in resummierter Störungstheorie [13] mit sehr großer Genauigkeit bestimmen und in in Abb. 5.4 sind die Ergebnisse gegen $(aT_c)^2$ aufgetragen. Für die eingetragenen Fehler wurden die statistischen Fehler der M_H-Werte und des kritischen Hoppingparameters berücksichtigt. Die Ableitung $\frac{\partial}{\partial\kappa} M_H\big|_{\beta,\lambda}$ wird dabei durch die Steigung

der Verbindungsgeraden der beiden $M_H(\kappa)$-Werte ersetzt, und der Einfluß aller Fehler wird aus 3000 normalverteilten Werten bestimmt. Die Fehler der Einträge mit $a^{-1} \geq 3T_c$ sind deutlich durch die Unsicherheit des kritischen Hoppingparameters dominiert.

Abbildung 5.4: *Kritische Temperatur in Einheiten der Higgsbosonmasse. Die durchgezogene Linie gibt die Extrapolation zu kleinen Gitterabständen und der linke Punkt den Kontiuumslimes an. Die gestrichelten Linien geben das störungstheoretische Resultat in den Ordnungen g^3 (oben) und g^4 (unten) an [13].*



Der führende skalenverletzende Term der Masse M_H ist von der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$. Unter der Annahme, daß für $a^{-1} = 2T_c$ die skalenverletzenden Terme höherer Ordnung bereits vernachlässigbar sind, ergibt sich die ebenfalls eingezeichnete Extrapolationsgerade zu kleinem Gitterabstand mit einem Schwankungsquadrat $\chi^2 = 1.1$. Im Kontinuumslimes ergibt sich

$$\frac{T_c}{M_H} = 2.147(40)\,, \tag{5.9}$$

dies ist ebenfalls in der Abbildung eingetragen. Der Fehler der Extrapolation wurde ebenfalls oben aus normalverteilten Werten bestimmt.

Die Skalenverletzung ist bemerkenswert gering, der Meßwert bei $a^{-1} = 2T_c$ ist $\approx 5\%$ geringer als der extrapolierte Kontinuumswert.

Zum Vergleich ist in der Abbildung ebenfalls das störungstheoretische Resultat für T_c/M_H aus [13] in den Ordnungen $\mathcal{O}(g^3)$ und $\mathcal{O}(g^4)$ eingetragen. Der Unterschied zwischen den Ordnungen ist extrem gering, so daß hier eine guten Konvergenz der Störungsreihe angenommen werden kann. Das störungstheoretische Resultat weicht etwas mehr als 3 Standardabweichungen vom Kontinuumslimes der Gittersimulation ab.

Eine analoge Untersuchung für T_c/M_W liefert $T_c/M_W = 0.910(15)$, und mit $M_W = 80$ GeV ergibt sich hieraus

$$T_c = 72.8 \pm 1.3 \text{ GeV}\,. \tag{5.10}$$

Die einzelnen T_c/M_H und T_c/M_W-Werte sind im Anhang in der Tabelle A.5 zu finden.

5.4 Spektrum in der Nähe des Phasenübergangs

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird das Teilchenspektrum in der Nähe des Phasenübergangs untersucht. Dazu wurden in den Messungen mit den Indizes m2'[a] und m2'[b] der Tabelle A.8 die in Abschnitt 5.1 beschriebenen Korrelationsfunktionen gemessen. Bei der gewählten Gitterausdehnung wurde während der Simulation kein Phasenübergang beobachtet, beide Konfigurationen waren metastabil. In der Higgsphase wurde eine integrierte Autokorrelationszeit $\tau_{\mathrm{int},\rho^2} \approx 200$ Sweeps und in der symmetrischen Phase $\tau_{\mathrm{int},\rho^2} \approx 20$ Sweeps gemessen, wobei in beiden Fällen der langsamere Spiegelungsalgorithmus für das Feld ρ_x verwendet wurde. Der benutzte Hoppingparameter $\kappa = 0.12865$ ist etwas kleiner als der kritische Wert $\kappa_c = 0.1286565(7)$, so daß sich aus der gemessenen κ-Abhängigkeit der W-Bosonmasse für die Simulationen eine Temperatur $T = 1.0062(9)T_c$ ergibt. Somit ist bei den hier betrachteten Parametern die Higgsphase metastabil und die symmetrische stabil.

Für beide Phasen wurden 16 stochastisch unabhängige Systeme simuliert und die Daten jedes Systems am Ende individuell gemittelt, so daß 16 unabhängige Datensätze für die Auswertung zur Verfügung standen. Die Massen wurden mit dem im Abschnitt 3.4 beschriebenen zweistufigen Verfahren bestimmt, dabei wurden zur Bestimmung des optimalen Fitintervalls vier exakte Eigenwerte der Korrelationsmatrix C behalten, alle weiteren wurden durch Mittelung geglättet. Es wurden nur die Abstände in der Analyse berücksichtigt, für die der Wert der jeweiligen Korrelationsfunktion signifikant von Null verschieden ist.

In der symmetrischen Phase erwies sich die Bestimmung eines Fitintervalls, in dem χ^2 der Anzahl der Freiheitsgrade entspricht, als unproblematisch. Die gemessene Korrelationsfunktion, die Fitkurven und Fitintervalle sind in der oberen Zeile der Abbildung 5.5 angegeben. In der Higgsphase ließ sich dagegen kein optimales Fitintervall zur Bestimmung der Higgsbosonmasse ermitteln, da sich in den korrelierten Fits mit Eigenwertglättung auf sehr großen Fitintervallen deutlich zu kleine χ^2-Werte ergeben. Auf dem Fitintervall von 2 bis 48 ergibt sich für die Fitkurve an die Korrelationsfunktion von ρ_x^2 ein Wert $\chi^2/\mathrm{Fgd.} = 0.3$, auf dem Intervall von 2 bis 20 ergibt sich hingegen $\chi^2/\mathrm{Fgd.} = 6$. Das χ^2 des kleineren Intervalls wird als Anzeichen dafür gewertet, daß die Korrelationsfunktion bei $z = 2$ noch deutlich durch *schwerere* Zustände beeinflußt ist und daß vier exakte Eigenwerte unzureichend sind, um die Korrelationen zwischen den Meßwerten ausreichend beschreiben zu können. Ein entsprechendes Verhalten wurde auch in den anderen Korrelationsfunktionen der Größen $L_{\varphi,x\mu}$ und $L_{\alpha,x\mu}$ festgestellt.

Als untere Grenze des Fitintervalls $z_{\min}$ wurde deshalb der kleinste z-Wert gewählt, für den sich mit einer Obergrenze 20 ein akzeptables $\chi^2/\mathrm{Fgd.}$ ergibt. Mit $z_{\min} = 4$ ergibt sich $\chi^2/\mathrm{Fgd.} = 0.98$. Anschließend wurde auf dem Intervall von $z_{\min}$ bis $z = 48$ ein unkorrelierter Fit zur Bestimmung der Masse durchgeführt. In der Untersuchung der W-Bosonmasse treten auch in der Higgsphase keine Probleme auf, die Korrelationsfunktionen der Higgsphase sind ebenfalls in der Abbildung 5.5 wiedergegeben, und die resultierenden Massenwerte beider Phasen sind in der Tabelle 5.1 zu finden. Die Fehler sind mit dem Jackknifeverfahren bestimmt worden.

Tabelle 5.1: *Ergebnis der Massenuntersuchung für $T = 1.0062(9)T_c$ im metastabilen Bereich . Für die Gitterkonstante gilt $a^{-1} = 2T$ und für die nackten Parameter $\beta = 8.0$ und $\lambda = 0.0003$. Es gilt $r_{HW} := m_H/m_W$.*

Phase	m_H	m_W	r_{HW}
sym.	0.180(5)	0.434(17)	0.414(28)
Higgs.	0.059(4)	0.299(5)	0.197(17)

Die Korrelationsfunktion zur Bestimmung der W-Bosonmasse in der symmetrischen Phase wird am deutlichsten durch angeregte Zustände beeinflußt, der Wert der Fitkurve bei $z=0$ ist hier deutlich geringer als der Wert der anderen Fitkurven an dieser Stelle. Dies führt unter anderem dazu, daß die Korrelationsfunktion im Bereich des Fitintervalls schon sehr *verrauscht* ist. Zur Verbesserung des Signals sollten in zukünftigen Untersuchungen Korrelationsfunktionen verschmierter Operatoren betrachtet werden [27].

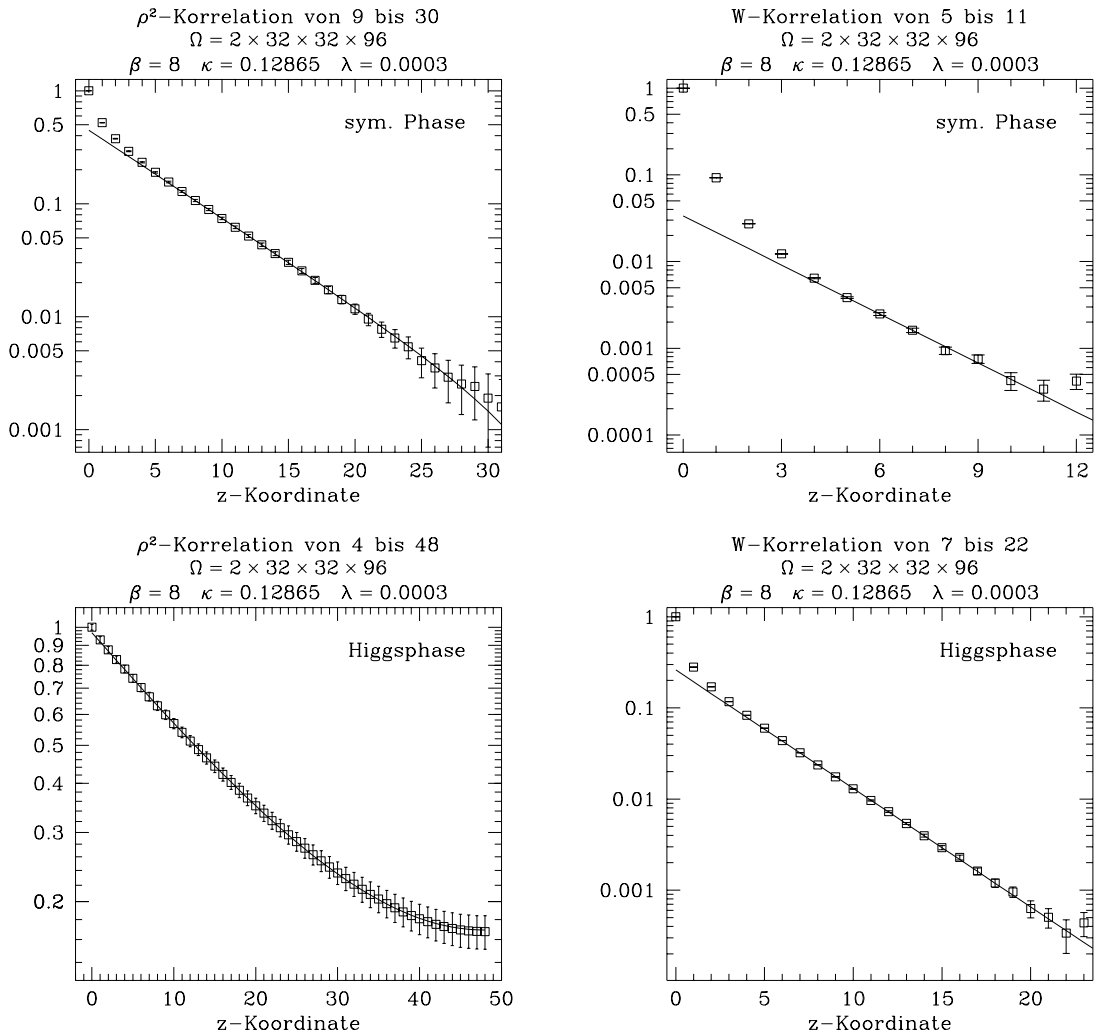
Der Vergleich mit den Massenwerten bei $T = 0$ aus der Tabelle A.3 ergibt einen deutlichen Abfall beider Massen wenn die Temperatur von $T = 0$ zu $T \approx T_c$ erhöht wird. In der Nähe des Phasenübergangs sind die Massenwerte der symmetrischen Phase deutlich größer als die entsprechenden Massen in der Higgsphase.

Das Massenspektrum in der symmetrischen Phase ist zur Zeit ein Gegenstand intensiver Untersuchungen. Wird die W-Bosonmasse $m_{W,\mathrm{s}}$ in der symmetrischen Phase aus eichinvarianten Operatoren bestimmt, so ergibt sich $m_{W,\mathrm{s}} \geq 1 \cdot g^2T$ [19, 25, 26, 27], und die Meßwerte zeigen eine nur geringe Abhängigkeit vom Wert der renormierten quartischen Selbstkopplung λ_R, siehe zum Beispiel [29]. Der hier bestimmte Wert $m_{W,\mathrm{s}} = 1.51(6) \cdot g^2T$ paßt sich gut in dieses Bild ein, vor allem, wenn der Anstieg von $m_{W,\mathrm{s}}/g^2T$ mit der Temperatur berück-

sichtigt wird [26].

Werden dagegen Korrelationsfunktion eichvarianter Operatoren betrachtet, so ergibt sich ein erheblich kleinerer Massenwert $m_{W,\mathrm{s}}$. So wurde zuerst in [57] durch die Benutzung von Gap-Gleichungen für die Higgs- und W-Bosonmasse in 1-Schleifenordnung eine obere Schranke $m_{W,\mathrm{s}} < 0.27 \cdot g^2 T$ bestimmt. Aus numerischen Simulationen wird in Landau-Eichung ein geringfügig größerer Wert $m_{W,\mathrm{s}} = 0.35(1) \cdot g^2 T$ berichtet [28]. Beide Untersuchungen benutzen eine dreidimensionale effektive Theorie. Die Ursachen für das unterschiedliche Verhalten der Korrelationsfunktionen eichinvarianter und eichvarianter Operatoren konnte bislang noch nicht zufriedenstellend geklärt werden.

Abbildung 5.5: *Korrelationsfunktionen zur Bestimmung des Spektrums in der Umgebung des Phasenübergangs.*



Kapitel 6

Oberflächenspannung

Die Dynamik des elektroschwachen Phasenübergangs wird wesentlich durch die Oberflächenspannung bestimmt. Dies soll zunächst ausgeführt werden. Im zweiten Abschnitt des Kapitels wird dann die numerische Messung mit Hilfe der 2-Kopplungs-Methode beschrieben, und das Ergebnis wird im folgenden Abschnitt mit den Ergebnissen anderer Bestimmungsverfahren verglichen.

6.1 Kondensationskeime

Da der Wert der W-Bosonmasse in der Higgsphase mit abnehmender Temperatur ansteigt, ergibt sich eine zusätzliche Unterdrückung der Sphaleronübergänge, falls die Temperatur T_f, bei der sich der Übergang von der symmetrischen in die Higgsphase vollzieht, deutlich unterhalb der kritischen Temperatur liegt. Für die Bestimmung der Übergangstemperatur ist die Dynamik des Phasenübergangs genauer zu betrachten.

Bei Abkühlung des elektroschwachen Plasmas unter die kritische Temperatur T_c bilden sich Blasen der Higgsphase in der symmetrischen Phase. Sind diese Blasen klein, so kann der erhöhte Druck im Blaseninneren die Oberflächenspannung nicht überwinden, und die Blase bildet sich zurück. Ist die Blase hingegen sehr groß, dann ist die Krümmung der Blasenoberfläche und somit ihre Kraft auf das Innere gering, die Blase vergrößert sich und bildet einen Keim für die Kondensation. Dazwischen gibt es eine kritische Blasengröße R_c, bei der sich die Kräfte die Waage halten. Für $T = T_c$ divergiert die kritische Blasengröße $R_c(T_c) = \infty$, da dort die Druckdifferenz ΔP zwischen den Phasen verschwindet.

Der Zerfall metastabiler Zustände durch Keimbildung wurde zunächst in nichtrelativistischer Fluiddynamik von Langer betrachtet [58]. Die Keimbildungsrate

$$\Gamma_B = \Gamma_0 \exp\left(-\frac{\Delta F(R_c)}{T}\right) \tag{6.1}$$

hängt danach exponentiell von der Differenz der freie Energie $\Delta F(R_c)$ zwischen einem System mit einer kritischen Blase und einer reinen metastabilen Phase ab. Für den Vorfaktor Γ_0 wird oft die Näherung $\Gamma_0 \approx T^4$ oder $\Gamma_0 \approx T_c^4$ verwendet.

Dünne Blasenwände

In der Abbildung 4.4 wird ein Blasenprofil, wie es im Rahmen der numerischen Simulationen auftritt, gezeigt. Deutlich ist die endlich Stärke der Blasenwand zu erkennen.

Ist der Radius R der Blase groß gegen die Stärke der Blasenwand, so wird $\Delta F(R)$ als Funktion von R durch

$$\Delta F(R) = -\frac{4\pi}{3}\Delta P\, R^3 + 4\pi\sigma R^2 + \mathcal{O}(R) \tag{6.2}$$

gegeben. Dabei bezeichnet σ die Oberflächenspannung der Blasenwand und $\Delta P := P_h - P_s$ die Druckdifferenz zwischen der Higgsphase und der symmetrischen Phase. Die kritische Blasengröße R_c ergibt sich aus dem Maximum von ΔF zu

$$R_{c,L} = \frac{2\sigma}{\Delta P}\,. \tag{6.3}$$

Die Größe $R_{c,L}$ wird als *Laplace-Radius* bezeichnet. Für $T = T_c$ verschwindet die Druckdifferenz und der Laplace-Radius divergiert, $R_{c,L}(T_c) = \infty$. Die Bestimmung der kritischen Blasengröße durch den Laplace-Radius $R_{c,L}$ ist nur im Fall kleiner Druckdifferenzen sinnvoll. In diesem Fall kann die Druckdifferenz durch die latente Wärme $\Delta\epsilon$ ausgedrückt werden

$$\Delta P \approx \Delta\epsilon \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) . \tag{6.4}$$

Diese Beziehung läßt sich unter Vernachlässigung des chemischen Potentials aus der Dichte $f \approx -P$ der freien Energie erhalten. Der Forderung nach kleinem ΔP entspricht somit die Forderung nach geringer Unterkühlung ($\frac{T_c - T}{T_c} \ll 1$) der symmetrischen Phase, wie intuitiv sofort klar ist. Damit gilt:

$$R_{c,L} = \frac{2\sigma}{\Delta\epsilon} \left[\frac{(T_c - T)}{T_c} \right]^{-1} ,$$

$$\frac{\Delta F(R_{c,L})}{T_c} = Q_F^2 \left[\frac{(T_c - T)}{T_c} \right]^{-2} ,$$

$$Q_F := \sqrt{\frac{16\pi}{3} \frac{\sigma^3}{(\Delta\epsilon)^2 T_c}} . \tag{6.5}$$

Die Übergangstemperatur T_f kann aus der Bedingung $\Delta F/T \approx 4 \log(M_{\text{Planck}}/T_c) \approx 160$ bestimmt werden [59]. In [60] werden Korrekturen hierzu betrachtet, und es wird die Bedingung $\Delta F/T \approx 106$ angegeben. Es ist zu prüfen, ob der erhaltene $R_{c,L}(T_f)$-Wert noch mit der Annahme einer dünnen Blasenwand verträglich ist. Die Forderung $R_{c,L}(T_f) \gg \xi_c$ bietet eine einfache Kontrollmöglichkeit. Mit ξ_c wird hier die größte Korrelationslänge am Phasenübergang bezeichnet, sie ist von ähnlicher Größe wie die Stärke der Blasenwand.

Ist die Temperatur T_0, bei der der Bereich der Metastabilität der symmetrischen Phase endet, bekannt, so bietet sich eine weitere Kontrollmöglichkeit. Für $T < T_0$ besitzt das *effektive Potential* nur ein lokales Minimum, das der Higgsphase zugeordnet ist. In [59] wird mit dem von Linde [61] vorgeschlagenen allgemeinen Ansatz für das effektive Potential gezeigt, daß $\Delta F(R_c)/T$ von F nur über $\bar{\lambda}(T) := (1 - T_0^2/T^2)/(1 - T_0^2/T_c^2)$ mit $\bar{\lambda}(T_0) = 0$ und $\bar{\lambda}(T_c) = 1$ abhängt. Mit der obigen Näherungsformel sind für $\bar{\lambda}(T_f) > 0.9$ vernünftige Resultate zu erwarten. Dies wird auch aus der Abbildung des Blasenprofils in [60] deutlich, für $\bar{\lambda} = 0.6$ wird im Blaseninneren der Vakuumerwartungswert der ungestörten Higgsphase nicht mehr erreicht.

In [62] wird die Konstante Γ_0 in Gl. (6.1) ebenfalls unter der Annahme, daß der Blasenradius groß gegen die Wandstärke ist, genauer bestimmt. Für den Fall des QCD-Phasenübergangs wird dies dort mit den Näherungen $\Gamma_0 \approx T^4$ oder $\Gamma_0 \approx T_c^4$ verglichen, und die Abweichung von den naiven Näherungen beträgt nie mehr als 2 Größenordnungen. Im Fall des elektroschwachen Phasenübergangs ist dies in [11] verglichen worden, und es wurde kein wesentlicher Effekt in den numerischen Ergebnissen festgestellt. Es ist hier noch interessant anzumerken, daß es in der Betrachtung [62] zur Bestimmung von Γ_0 notwendig ist, die Wärmeleitung des Plasmas zu berücksichtigen. Andernfalls würde die freigesetzte latente Wärme ein Blasenwachstum verhindern, und es würde sich $\Gamma_0 = 0$ ergeben.

6.2 Oberflächenspannung und 2-Kopplungs-Methode

Zur Messung der Oberflächenspannung wird hier die 2-Kopplungs-Methode benutzt. Dieses Verfahren wurde in [63] zur Messung der Oberflächenspannung in Potts-Modellen und der des QCD-Phasenübergangs benutzt. Zur Einsparung von Rechenzeit wird es hier in einer modifizierten Form verwendet. Weitere Verfahren zur Bestimmung der Oberflächenspannung in numerischen Simulationen werden im Abschnitt 6.3 vorgestellt.

Das Endergebnis dieses Abschnitts wird in der Gleichung (6.29) angegeben.

Freie Wirkung $\hat{F}$

Die Wirkung (2.6) kann einerseits als Wirkung des diskretisierten SU(2)-Higgs-Modells in drei räumlichen Dimensionen bei imaginärer Zeit aufgefaßt werden, zum anderen kann $S[U, \varphi]$ aber auch als Ha-

miltonoperator eines klassischen Spinmodells in 4 räumlichen Dimensionen angesehen werden. Wie im vorstehenden Abschnitt ausgeführt wurde, ist hier die Oberflächenspannung des SU(2)-Higgs-Modells in drei räumlichen Dimensionen von physikalischem Interesse. Die zugeordnete Grenzfläche ist eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit. Tritt in den Simulationen eine Konfiguration auf, in der sich ein Teilvolumen in der symmetrischen Phase und ein anderes in der Higgsphase befindet, so sind die Grenzflächen dreidimensional. Hierbei ist anzumerken, daß durch die kurze Ausdehnung des Gitters in t-Richtung die t-Achse nahezu senkrecht zur Flächennormalen der Grenzfläche verläuft, und die Ausdehnung der Blasenwand parallel zur t-Richtung deutlich kleiner als in den beiden anderen Dimensionen ist.

In einer kurzen thermodynamischen Betrachtung soll verdeutlicht werden, daß die Oberflächenspannung des analogen Spinmodells in 4 räumlichen Dimensionen identisch mit der gesuchten Oberflächenspannung des SU(2)-Higgs-Modells in (3+1) Dimensionen ist.

Betrachte dazu die Dichte s der euklidischen Wirkung S:

$$s := \frac{1}{\Omega} S\,, \qquad \text{mit} \quad \Omega := L_t L_x L_y L_z\,. \tag{6.6}$$

Dazu wird $N(s)$ als Maß für die Anzahl der Zustände bei vorgegebenem s wie folgt definiert:

$$N(s) := \int \mathcal{D}U\, \mathcal{D}\varphi\, \delta\left(s - \frac{S[U,\varphi]}{\Omega}\right)\,,$$

$$d(s) := \frac{1}{\Omega}\log(N(s))\,. \tag{6.7}$$

Für die Zustandssumme Z gilt damit:

$$\begin{aligned} Z &:= \int \mathcal{D}U\, \mathcal{D}\varphi\, \exp(-\tfrac{1}{\Theta} S) \\ &= \int ds\, N(s) \exp(-\tfrac{1}{\Theta}\Omega s) \\ &= \int ds \exp(-\tfrac{1}{\Theta}\Omega[s - \Theta d(s)])\,. \end{aligned} \tag{6.8}$$

Mit der zusätzlichen Konstanten Θ wird hier die Temperatur in der thermodynamischen Beschreibung des vierdimensionalen Spinmodells bezeichnet. Für feldtheoretische Untersuchungen in (3+1) Dimensionen ist $\Theta = 1$ zu setzen, die Temperatur wird dann durch die Gitterausdehnung in Zeitrichtung gegeben.

Die freie Wirkung $\hat{F}$ und die zugehörige Dichte $\hat{f}$ werden durch den Logarithmus der Zustandssumme Z gegeben

$$\hat{F} := -\Theta \log(Z)\,, \qquad \hat{f} := \frac{1}{\Omega}\hat{F}\,. \tag{6.9}$$

$\hat{F}$ bezeichnet die Legendretransformierte der Wirkung S, somit handelt es sich um die freie Energie des Spinmodells auf dem vierdimensionalen Volumen Ω. In dieser Betrachtungsweise entspricht $\langle d(s)\rangle$ der Entropiedichte, und im thermodynamischen Limes ($\Omega \to \infty$) gilt

$$\hat{F} = \Omega[\,\langle\, s\,\rangle - \Theta\langle\, d(s)\,\rangle\,] + \ldots\,. \tag{6.10}$$

Am kritischen Punkt sind die freien Wirkungen der symmetrischen und der Higgsphase gleich, der durch die Phasengrenzen hervorgerufene Anstieg der freien Wirkung kann durch das Produkt der dreidimensionalen Fläche $A_{(3)}$ der Blasenwände mit der Oberflächenspannung $\hat{\sigma}$ parametrisiert werden, also

$$A_{(3)}\hat{\sigma} = \Delta\hat{F}\,. \tag{6.11}$$

Die freie Energie F des SU(2)-Higgs-Modells läßt sich mit

$$F = -T\,\log(Z|_{\Theta=1}) \tag{6.12}$$

aus Z erhalten. Für die Oberflächenspannung gilt hier

$$A_{(2)}\sigma = \Delta F\,, \tag{6.13}$$

wobei durch ΔF der Anstieg der freien Energie durch die Phasengrenzen bezeichnet wird. Wird nun durch geeignete Randbedingungen sichergestellt, daß die Zeitrichtung senkrecht auf den Flächennormalen der Phasengrenzen steht, so gilt $A_{(3)} = L_t A_{(2)}$. Wird weiterhin $L_t = T^{-1}$ und $F = T\,\hat{F}|_{\Theta=1}$ benutzt, so ergibt sich schließlich

$$\sigma \equiv \hat{\sigma}\,. \tag{6.14}$$

Die Oberflächenspannungen des klassischen Spinmodells in vier Dimensionen und die der Gitterfeldtheorie in (3+1) Dimensionen sind somit identisch,

es sind keine Faktoren zu berücksichtigen. Im weiteren wird $\Theta = 1$ gesetzt. Es ist noch anzumerken, daß in den Gleichungen (6.11) und (6.13) vorausgesetzt wird, daß die Phasengrenzen so weit voneinander entfernt sind, daß sich zwischen ihnen reine, nahezu ungestörte Phasen ausbilden.

Erzwungene Oberflächen

In der Simulation werden nun durch die Wahl der gleichen Randbedingungen wie in Abschnitt 4.4 Phasengrenzflächen erzwungen. Das Gitter wird entlang der langen z-Richtung in zwei Teile unterteilt, und für Gitterpunkte mit z-Koordinate $z \leq \frac{1}{2}L_z$ wird der Hoppingparameter $\kappa_1 < \kappa_c$, für die anderen $\kappa_2 > \kappa_c$ gewählt. Durch diese Randbedingung und geeignete Initialisierung der Feldkonfiguration wird sichergestellt, daß sich zwei Grenzflächen mit zur z-Richtung paralleler Flächennormalen bei den z-Koordinaten $z \approx \frac{1}{2}L_z$ und $z \approx L_z$ ausbilden, siehe auch Abbildung 4.3. Zur Bestimmung der Oberflächenspannung wird nun $\tilde{\sigma}(\kappa_1, \kappa_2)$ auf endlichem Gitter entsprechend Gleichung (6.11) durch

$$\begin{aligned}
&\tilde{\sigma}(\kappa_1,\kappa_2)\,(2L_xL_yL_t) \\
&\quad := \quad \hat{F}(\kappa_1,\kappa_2) - \frac{\hat{F}(\kappa_1,\kappa_1)+\hat{F}(\kappa_2,\kappa_2)}{2} \\
&\quad = \quad \frac{1}{2}\Bigg[\int_{\kappa_1}^{\kappa_2}\frac{\partial}{\partial v_2}\hat{F}(\kappa_1,v_2)dv_2 \\
&\qquad\qquad - \int_{\kappa_1}^{\kappa_2}\frac{\partial}{\partial v_1}\hat{F}(v_1,\kappa_2)dv_1\Bigg] \qquad (6.15)
\end{aligned}$$

definiert. Hierbei bezeichnet $\hat{F}(\kappa_1, \kappa_2)$ die freie Wirkung bei Benutzung der Hoppingparameter κ_1 und κ_2 in den Teilvolumina. Die freie Wirkung der reinen Phasen wird dabei durch den arithmetischen Mittelwert der freien Wirkungen bei κ_1 und κ_2 ersetzt.

Zur Bestimmung der Oberflächenspannung aus $\tilde{\sigma}(\kappa_1, \kappa_2)$ sind die folgenden Grenzwerte zu betrachten

$$\sigma = \lim_{\kappa_1 \nearrow \kappa_c}\ \lim_{\kappa_2 \searrow \kappa_c}\ \Big[\lim_{V\to\infty}\ \tilde{\sigma}(\kappa_1,\kappa_2)\Big]\,. \qquad (6.16)$$

Hier ist zu beachten, daß die Grenzwerte nicht vertauschen und zuerst $(V \to \infty)$ zu betrachten ist, andernfalls führt die Stetigkeit thermodynamischer Potentiale im endlichen Volumen zum Verschwinden von $\Delta\hat{F}$.

Aus (6.9) ergibt sich für die Ableitungen in (6.15)

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial v_2}\hat{F}(\kappa_1,v_2)\Big|_{v_2=\kappa_2} \\
&\quad = \quad \left\langle\frac{\partial}{\partial v}S(\kappa_1,v_2)\right\rangle\Big|_{v_2=\kappa_2} \\
&\quad = \quad -\sum_{\mu=1}^{4}\sum_{\substack{x,y,z,t\\ z>L_z/2}}\langle 2L_{\varphi,x\mu}\rangle\Big|_{\kappa_1,\kappa_2} \\
&\quad =: \quad -4\Omega\ L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,\kappa_2)\,, \\
&\frac{\partial}{\partial v_1}\hat{F}(v_1,\kappa_2)\Big|_{v_1=\kappa_1} \\
&\quad = \quad -\sum_{\mu=1}^{4}\sum_{\substack{x,y,z,t\\ z\leq L_z/2}}\langle 2L_{\varphi,x\mu}\rangle\Big|_{\kappa_1,\kappa_2} \\
&\quad =: \quad -4\Omega\ L_\varphi^{(1)}(\kappa_1,\kappa_2)\,. \qquad (6.17)
\end{aligned}$$

Die Symbole $L_\varphi^{(1)}(\kappa_1, \kappa_2)$ und $L_\varphi^{(2)}(\kappa_1, \kappa_2)$ bezeichnen den Erwartungswert von $L_{\varphi,x\mu}$ gemittelt über das Teilvolumen mit $z \leq \frac{1}{2}L_z$ bzw. $z > \frac{1}{2}L_z$. Damit gilt:

$$\begin{aligned}
&\tilde{\sigma}(\kappa_1,\kappa_2) \\
&\quad = \quad L_z\Bigg[\int_{\kappa_1}^{\kappa_2}L_\varphi^{(1)}(v_1,\kappa_2)dv_1 \\
&\qquad\qquad - \int_{\kappa_1}^{\kappa_2}L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,v_2)dv_2\Bigg] \qquad (6.18) \\
&\quad \approx \quad L_z(\kappa_2-\kappa_1) \\
&\qquad\cdot\Bigg[\frac{L_\varphi^{(1)}(\kappa_1,\kappa_2)+L_\varphi^{(1)}(\kappa_2,\kappa_2)}{2} \\
&\qquad\qquad - \frac{L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,\kappa_2)+L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,\kappa_1)}{2}\Bigg]\,. \qquad (6.19)
\end{aligned}$$

In der Näherung (6.19) werden die Integrale durch die von den Randwerten gegebenen Trapeze approximiert. Diese Näherung läßt sich in einem einfachen Modell motivieren.

Modell für das Verhalten der Integranden

In dem betrachteten Modell wird zunächst angenommen, daß die Dicke der Grenzflächen vernachlässigbar ist, dies sollte für große L_z-Werte eine gute Annahme sein. Weiterhin wird davon ausgegangen, daß die Grenzflächen, sofern eine 2-Phasensituation vorliegt, eben sind und daß ihre Flächennormale parallel zur z-Achse verläuft. Wird zunächst $L^{(2)}(\kappa_1, v_2)$ betrachtet, so soll sich der Bereich mit Hoppingparameter κ_1 komplett in der symmetrischen Phase befinden. Grenzflächen treten nur im Bereich $L_z/2 \le z \le L_z$ auf. Diese Annahme erscheint für $\kappa_c - \kappa_1 \gg |v_2 - \kappa_c|$ vernünftig, da dann die Differenz der freien Wirkungen der reinen Phasen im Bereich $0 \le z \le L_z/2$ größer als im Bereich $L_z/2 \le z \le L_z$ ist. Hierdurch sind *Blasen* der metastabilen Phase im erstgenannten Bereich stärker unterdrückt. Situationen mit mehr als zwei Grenzflächen werden nicht betrachtet, für sehr große L_z-Werte stellt dies eine weitere Näherung da.

Die Wahrscheinlichkeit $p_{\rm mix}(z_1, z_2)$ für eine Situation mit Grenzflächen bei z_1 und z_2 ergibt sich damit zu

$$\begin{aligned} & p_{\rm mix}(z_1, z_2) \\ & \sim \quad \exp\Big(- A_{(3)}\Big[2\sigma + \hat{f}_h(z_2 - z_1) \\ & \qquad + \hat{f}_s(\tfrac{1}{2}L_z - (z_2 - z_1))\Big]\Big) , \end{aligned} \tag{6.20}$$

mit

$$\tfrac{1}{2}L_z \le z_1 < z_2 \le L_z \, .$$

Hierbei bezeichnen $\hat{f}_h$ und $\hat{f}_s$ die Dichte der freien Wirkung in der Higgs- bzw. der symmetrischen Phase. Entsprechend beträgt die Wahrscheinlichkeit $p_{\rm pur}$ für eine reine symmetrische Phase

$$p_{\rm pur} \sim \exp\left(-\tfrac{1}{2}\hat{f}_s L_z A_{(3)}\right) \, . \tag{6.21}$$

Mit diesen Wahrscheinlichkeiten ergibt sich

$$L_\varphi^{(2)}(\kappa_1, v_2) = \frac{1}{Z_{\rm md}}\Bigg[L_{\varphi,s} p_{\rm pur} + \int_{L_z/2}^{L_z-1} dz_1 \int_{z_1}^{L_z} dz_2 \, \frac{(L_{\varphi,h} - L_{\varphi,s})(z_2 - z_1) + L_{\varphi,s}\frac{1}{2}L_z}{\frac{1}{2}L_z} p_{\rm mix}(z_1, z_2)\Bigg] , \tag{6.22}$$

mit

$$Z_{\rm md} = p_{\rm pur} + \int_{L_z/2}^{L_z-1} dz_1 \int_{z_1}^{L_z} dz_2 \, p_{\rm mix}(z_1, z_2) \, .$$

Mit $L_{\varphi,s}$ wird hier der Erwartungswert von $L_{\varphi,x\mu}$ in der symmetrischen Phase und mit $L_{\varphi,h}$ der in der Higgsphase bezeichnet. Die Abhängigkeit dieser Erwartungswerte von den Hoppingparametern wird im folgenden nicht betrachtet, da sie im Grenzfall $\kappa_2 \searrow \kappa_c$ und $\kappa_1 \nearrow \kappa_c$ irrelevant ist. Die Integrale lassen sich analytisch lösen, und $L_\varphi^{(2)}(\kappa_1, v_2)$ hängt nur über $\Delta\hat{f} := \hat{f}_h - \hat{f}_s$ von den Dichten der freien Wirkung ab. Für $v_2 = \kappa_c$ gilt $\Delta\hat{f} = 0$, dies motiviert den linearen Ansatz

$$\Delta\hat{f} = -b\,(\Delta v_2) + \ldots , \tag{6.23}$$

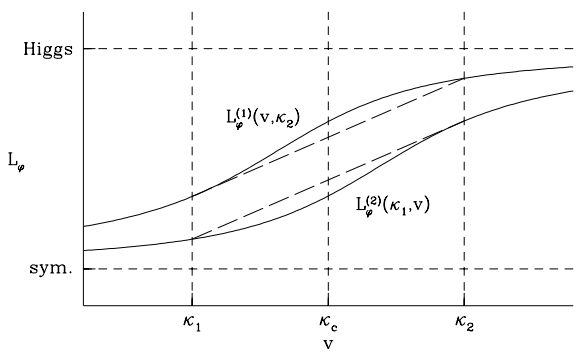
$$b > 0 \, , \qquad \Delta v_2 := v_2 - \kappa_c \, .$$

Das Ergebnis des Modells für $L_\varphi^{(2)}(\kappa_1, v_2)$ und $L_\varphi^{(1)}(v_1, \kappa_2)$ wird in Abb. 6.1 wiedergegeben. In dem betrachteten Ausschnitt können die Funktionen sinnvoll linear approximiert werden.

Vergrößern von L_z erhöht in (6.22) nur den volumenabhängigen Beitrag zur freien Wirkung bei konstantem Oberflächenanteil. Dadurch schieben sich die Übergangspunkte näher an κ_c, bis κ_c in dem Bereich liegt, in dem eine deutliche Abweichung der $L_\varphi^{(i)}$-Werte von $L_{\varphi,s}$ bzw. $L_{\varphi,h}$ zu beobachten ist. Dieser Fall ist in der Abbildung wiedergegeben. Neben dem Ergebnis der Modellrechnung wird in Abb. 6.1 auch die Näherung (6.19) durch die gestrichelten Linien angegeben. Der systematische Fehler der linearen Näherung ist sehr schwer abzuschätzen, da er zum einen davon abhängt, wie nahe die κ_i-Werte an den kritischen Wert κ_c geschoben werden können, bevor sich die Grenzflächen berühren, und zum anderen davon ob der vernachlässigte Anteil des Integrals im Grenzfall $\kappa_i \to \kappa_c$ und $V \to \infty$ überhaupt beiträgt. Der systematische Fehler der Approximation wird hier durch den Vergleich mit Meßwerten, die mit anderen Methoden erhalten worden sind, kontrolliert, siehe Abschnitt 6.3.

Soll die lineare Approximation vermieden werden, so ist $L_\varphi^{(i)}$ im Intervall $\kappa_1 \le v \le \kappa_2$ mit ausreichender Feinheit in v zu messen. In der Umgebung

Abbildung 6.1: *Resultat des im Text beschriebenen Modells für das Verhalten von $L_\varphi^{(1)}(v,\kappa_2)$ und $L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,v)$ in der Nähe des Phasenübergangs. Die gestrichelten Linien geben die in (6.19) angewandte Approximation wieder.*



des Überganspunktes sind dazu Simulationen notwendig, die oft zwischen einer Situation mit und ohne Grenzflächen wechseln. Die Übergangsrate ist aber bei den hier betrachteten Gittern extrem gering, vgl. [20], so daß bei diesem Vorgehen sehr viel Rechenzeit verbraucht würde.

Laurentansatz

Das Ziel der Untersuchung sind die Anteile aus (6.19), die im Grenzfall verschwindender Hoppingparameterdifferenz nicht verschwinden, d.h. Beiträge der Ordnung $\mathcal{O}([\kappa_i-\kappa_c]^{-1})$ in $L_\varphi^{(i)}$. Derartige Anteile in den Termen mit gleichen Hoppingparametern entstehen durch den Einfluß der metastabilen Phase, diese werden in einer weiteren Approximation vernachlässigt, d.h. es wird in (6.19)

$$L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,\kappa_1) \to L_{\varphi,s}\,,$$

$$L_\varphi^{(1)}(\kappa_2,\kappa_2) \to L_{\varphi,h}\,, \tag{6.24}$$

ersetzt. Betrachtet man die Abbildung 6.1, so kompensieren sich die systematischen Fehler dieser Ersetzung und der Näherung in (6.19) zu einem großen Teil. Damit gilt dann

$$\sigma \approx \lim_{\kappa_1 \nearrow \kappa_c} \lim_{\kappa_2 \searrow \kappa_c} (\kappa_2-\kappa_1) \left[\lim_{L_z\to\infty} \tfrac{1}{2} L_z \left\{ L_\varphi^{(1)}(\kappa_1,\kappa_2) - L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,\kappa_2)\right\}\right]. \tag{6.25}$$

Für die verbleibenden Terme $L_\varphi^{(1)}(\kappa_1,\kappa_2)$ und $L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,\kappa_2)$ wird nun ein Laurentansatz benutzt

$$\begin{aligned} &L_\varphi^{(1)}(\kappa_1,\kappa_2) \\ &\quad = \frac{-a_1}{\kappa_1-\kappa_c} + b_1 + c_1(\kappa_1-\kappa_c) + \mathcal{O}([\kappa_1-\kappa_c]^2)\,, \\ &L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,\kappa_2) \\ &\quad = \frac{-a_2}{\kappa_2-\kappa_c} + b_2 + c_2(\kappa_2-\kappa_c) + \mathcal{O}([\kappa_2-\kappa_c]^2)\,. \end{aligned} \tag{6.26}$$

Damit ergibt sich für die Oberflächenspannung bei endlichen Volumen

$$\sigma \approx L_z(a_1+a_2)\,. \tag{6.27}$$

Da zuerst der Grenzwert $V \to \infty$ zu betrachten ist, müssen die Randwerte des Integrals κ_1 und κ_2 bei der Bestimmung auf dem endlichen Gitter derart gewählt werden, daß sich die Grenzflächen nicht berühren. Im Fall deutlich getrennter Grenzflächen führt das Vergrößern der Gitterausdehnung in z-Richtung zu einer Verlängerung der Bereiche mit einer ungestörten reinen Phase in der Umgebung von $z \approx L_z/4$ bzw. $3L_z/4$, wie sie in der Abbildung 4.3 deutlich zu erkennen sind. Der Einfluß der Oberflächenspannung drückt sich in der Abweichung der $L_\varphi^{(i)}$ vom Erwartungswert der reinen ungestörten Phase aus. Solange die beiden Grenzflächen im Simulationsvolumen keinen bedeutenden Einfluß auf einander ausüben, ist für die Bestimmung der Oberflächenspannung eine Veränderung von L_z irrelevant. In diesem Fall hebt sich dann der Faktor L_z in (6.27) gegen den Faktor $1/L_z$ aus der Mittelwertbildung (6.17) weg. Es ist sinnvoll, L_z so kurz zu wählen, daß sich für das kleinste untersuchte Intervall (κ_1,κ_2) die Grenzflächen gerade nicht berühren. Dies verbessert das Verhältnis aus Signal und Rauschen in der Messung. Zur Kontrolle ob eine deutliche Wechselwirkung zwischen

den Grenzflächen stattfindet, ist das Profil der z-Scheibenerwartungswerte des Operators $L_{\varphi,x\mu}$ zu betrachten, und außerdem sind die χ^2-Werte der Laurentfits (6.26) zu kontrollieren.

Simulation

Zur Bestimmung der Oberflächenspannung in der **m**-Meßreihe bei $a^{-1} = 2T_c$ wurden $L_\varphi^{(1)}$ und $L_\varphi^{(2)}$ bei fünf verschiedenen Hoppingparameterintevallen gemessen. Dabei wurden die Parameter $\Omega = 2 \times 24 \times 24 \times 200$, $\beta = 8.0$ und $\lambda = 0.0003$ benutzt. Die weiteren Parameter und die Anzahl der Sweeps können zusammen mit den Resultaten für $L_\varphi^{(1)}$, $L_\varphi^{(2)}$ und $\Delta L_\varphi := L_\varphi^{(2)} - L_\varphi^{(1)}$ der Tabelle A.6 entnommen werden.

An dieser Stelle ist es wichtig zu bemerken, daß der statistische Fehler von ΔL_φ kleiner ist als der von $L_\varphi^{(2)}$. Dies ist auf Verschiebungen der Grenzflächen während der Simulation zurückzuführen. Dies soll kurz anhand der Grenzfläche bei $z \approx \frac{1}{2}L_z$ erläutert werden. Verschiebt sich diese Phasengrenze zu $z < \frac{1}{2}L_z$, so werden beide $L_\varphi^{(i)}$-Erwartungswerte größer, ihre Differenz wird dadurch aber nicht so stark beeinflußt, hier kompensiert sich der Effekt. Diese Korrelationen sind auch bei der Bestimmung des statistischen Fehlers der Oberflächenspannung zu berücksichtigen. Das Naheliegenste wäre es nun ΔL_φ mit einem zu (6.26) analogen Ansatz zu fitten. Leider sind die benutzten Intervalle (κ_1, κ_2) nicht symmetrisch zu dem besten Meßwert des kritischen Hoppingparameters $\kappa_c = 0.1286565(7)$, der für die benutzten Parameter existiert, siehe Tab. 4.2.

Um diese Korrelationen dennoch in der Fehlerabschätzung von σ berücksichtigen zu können, wurde ein modifiziertes Bootstrapverfahren angewandt [55]. Um den Einfluß der Autokorrelation aus der Fehlerauswertung zu eliminieren, werden, wie in anderen Auswertungsverfahren auch, die Messungen in Blöcken zusammengefaßt. Hier wird eine Blocklänge von 200 Messungen benutzt, so daß für jedes Hoppingparameterpaar zwischen 50 und 70 stochastisch unabhängige Messungen zur Verfügung stehen.

Hinter dem Bootstrapverfahren steht die Idee, die durch die Messungen gegebene Verteilung auch zur Fehlerauswertung zu benutzen. Dabei wird der zentrale Grenzwertsatz nicht benutzt. Stehen für das j-te Hoppingparameterpaar $(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ insgesamt N_j Messungen zur Verfügung, so wird eine Indexmenge $I_j := \{i_1, \ldots, i_{N_j}\}$ durch Ziehen mit Zurücklegen aus den Zahlen $1, \ldots, N_j$ gebildet. Dies sind $(N_j)^{N_j}$ mögliche Kombinationen. Ist die Indexmenge I_j für ein Paar $(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ bestimmt, so werden hieraus die Mittelwerte $\overline{L}_\varphi^{(1)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ und $\overline{L}_\varphi^{(2)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ wie folgt bestimmt

$$\overline{L}_\varphi^{(i)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j}) := \frac{1}{N_j} \sum_{n \in I_j} L_{\varphi,n}^{(i)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j}) \,. \quad (6.28)$$

Dabei bezeichnet $L_{\varphi,n}^{(i)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ den $L_\varphi^{(i)}$-Wert aus der n-ten Messung. Damit die Korrelationen hier in der richtigen Weise berücksichtigt werden, ist es wichtig, daß zur Bestimmung von $\overline{L}_{\varphi,n}^{(1)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ und $\overline{L}_{\varphi,n}^{(2)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ die gleichen Konfigurationen ausgewertet werden.

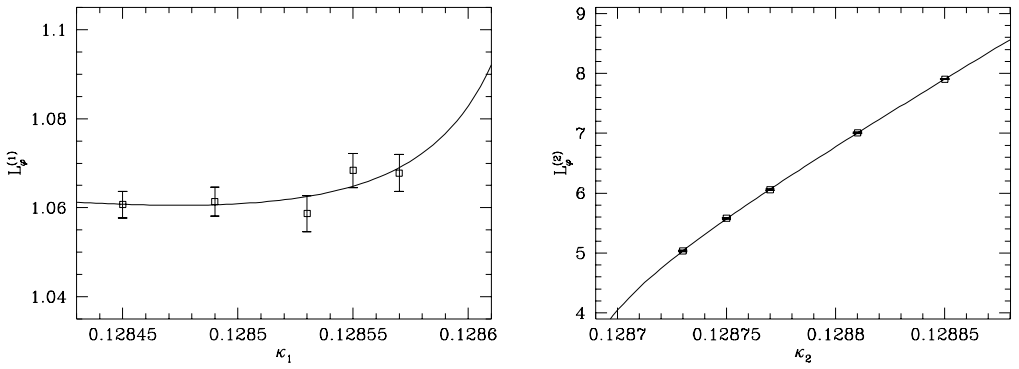
Sind für alle Hoppingparameterpaare die Mittelwerte $\overline{L}_\varphi^{(i)}(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$ bestimmt, so werden daraus die Fitkoeffizienten und die Oberflächenspannung ermittelt. Anschließend wird das Verfahren von der Bestimmung der Indexmengen an wiederholt, und die erhaltenen Werte der Koeffizienten und der Oberflächenspannung werden der Größe nach in Tabellen geschrieben. Das zentrale 68.3%-Intervall in diesen Tabellen gibt den Bereich des statistischen Fehlers an. In dieser Untersuchung wurden für jedes Hoppingparameterpaar 1000 Indexmengen bestimmt.

Die Fitkurven (6.26) an die Daten sind in der Abbildung 6.2 dargestellt, die erhaltenen Fitkoeffizienten und die χ^2-Werte sind in der Tabelle A.7 abgedruckt. Da die χ^2-Werte der Fits nahe an 2 liegen, kann das Verhalten der $L_\varphi^{(i)}$ in den untersuchten κ_i-Bereichen durch den Ansatz (6.26) beschrieben werden. Aus (6.27) ergibt sich damit das Resultat

$$\frac{\sigma}{T_c^3} = 0.065(9+1) \,. \quad (6.29)$$

Die erste Zahl in der Klammer gibt den statistischen Fehler aus dem Bootstrapverfahren an, die zweite

Abbildung 6.2: *Laurentfit zur Bestimmung der Oberflächenspannung.*



steht für den Einfluß des Fehlers des kritischen Hoppingparameters auf das Fitergebnis. Dazu wurde die Auswertung mit $\kappa_c = 0.1286558$ und 0.1286572 wiederholt.

Zur weiteren Kontrolle des Ansatzes (6.26) wurde der quadratischen Ansatz $L_\varphi^{(i)} = b_i + c_i(\kappa_i - \kappa_c) + d_i(\kappa_i - \kappa_c)^2$ zur Beschreibung der Daten aus Tabelle A.6 geprüft. Hierfür ergibt sich $\chi_1^2 = 1.85$ und $\chi_2^2 = 4.15$. Der zweite Wert ist etwas zu hoch, die Meßdaten lassen sich somit durch den Ansatz (6.26) besser beschreiben. Durch die geringe Krümmung der $L_\varphi^{(1)}$-Werte besitzt χ_1^2 keine große Aussagekraft für die Auswahl des Ansatzes.

Darüberhinaus wurde geprüft, wie sich das Resultat verändert, wenn in (6.26) der quadratische Term hinzugenommen wird. Hierfür ergeben sich $\chi_1^2 = 1.85$ und $\chi_2^2 = 1.49$. Hier ist keine relevante Veränderung zu den Werten in TabelleA.7 festzustellen. Somit ist der 4. Parameter kein wirklicher Freiheitsgrad. Aus den Koeffizienten dieses Ansatzes ergibt sich $\sigma/T_c^3 = 0.063$, dieser Wert liegt innerhalb des Intervalls, das in Gleichung (6.29) durch den statistischen Fehler vorgegeben wird.

Die beschriebenen Korrelationen zwischen den $L_\varphi^{(i)}$ werden durch das beschriebene Fehlerauswertungsverfahren berücksichtigt. Dies ist daran zu erkennen, daß der statistische Fehler von σ/T_c^3 kleiner als der von $L_z a_2/T_c^3$ ist. Das Verhältnis dieser Fehler entspricht dem Verhältnis der statistischen Fehler der Größen ΔL_φ und $L_\varphi^{(2)}$ in Tabelle A.6.

Die benutzten $(\kappa_{1j}, \kappa_{2j})$-Werte sind symmetrisch zu $\kappa_m = 0.12865$. Wird ΔL_φ mit einem zu (6.26) analogen Ansatz gefittet, dabei wird κ_c durch κ_m ersetzt, so ergibt sich $\sigma/T_c^3 = 0.75(11)$. Hierbei kann der Fehler aus normalverteilten ΔL_φ-Werten bestimmt werden, da die Korrelationen in der Differenzbildung in Tabelle A.6 berücksichtigt sind. Separate Fits für die $L_\varphi^{(i)}$ mit dem obigen Bootstrapverfahren ergeben, wenn in (6.26) κ_c durch κ_m ersetzt wird, das gleiche Ergebnis $\sigma/T_c^3 = 0.75(11)$. Die identischen Resultate für die Oberflächenspannung und den statistischen Fehler sind ein weiterer Hinweis, daß die Korrelationen in der richtigen Weise berücksichtigt werden. Der Einfluß der Unsicherheit des kritischen Hoppingparameters wurde hier nicht bestimmt, da nur das Bootstrapverfahren studiert werden soll.

Einfluß des räumlichen Volumens und der Gitterkonstanten

Mit dem beschriebenen Verfahren wird in [18, 19] die Oberflächenspannung in der **l**- und **h**-Meßreihe bei einem Gitterabstand $a^{-1} = 2T_c$ untersucht. Als Resultat wird sich

$$\left.\frac{\sigma}{T_c^3}\right|_{\mathrm{l}} = 0.84(16)\,, \qquad \left.\frac{\sigma}{T_c^3}\right|_{\mathrm{h}} = 0.008(2)\,. \tag{6.30}$$

Das Ergebnis der **l**-Meßreihe wird auf einem Gitter $\Omega = 2 \times 16^2 \times 128$ bestimmt. Zur Untersuchung des Einflusses der Gitterausdehnungen L_x und L_y auf

das Simulationsergebnis wird die Bestimmung der Oberflächenspannung im Fall des **1**-Meßpunktes auf einem Gitter $2 \times 8^2 \times 128$ wiederholt. Innerhalb des statistischen Fehlers ist keine Abweichung von dem Ergebnis des größeren Gitters festzustellen.

In einer neuen Untersuchung [22] wird der Einfluß der Gitterkonstanten auf das Simulationsergebnis studiert. Dazu wird bei einer Gitterkonstanten $a^{-1} = 3T_c$ ebenfalls für den **1**-Meßpunkt die Oberflächenspannung bestimmt. Auf einem Gitter der Größe $3 \times 24 \times 24 \times 192$ mit den Parametern $\beta = 8.15$ und $\lambda = 0.00011$ ergibt sich

$$\left.\frac{\sigma}{T_c^3}\right|_{\mathbf{1}} = 0.77(10)\,, \qquad a = \frac{1}{3T_c}\,. \tag{6.31}$$

Dies stimmt sehr gut mit dem Ergebnis in (6.30) überein, die vorgestellte Methode erweist sich damit als stabil gegen die Änderung des physikalischen Volumens und der Gitterkonstanten.

6.3 Vakuumtunneln und Histogramm

Zur Kontrolle der systematischen Fehler, die in der obigen Analyse durch die gemachten Näherungen entstehen, ist der Vergleich der Ergebnisse mit den Resultaten anderer Untersuchungen notwendig. Für das hier untersuchte SU(2)-Higgs-Modell ist die Oberflächenspannung mit zwei weiteren Methoden auf einem vierdimensionalen euklidischen Gitter bestimmt worden.

Vakuumtunneln

Im endlichen Volumen ist der Grundzustand des Hamiltonoperators eindeutig, d.h. durch die nichtverschwindende Übergangsrate zwischen der symmetrischen Phase und der Higgsphase wird die Entartung, wie sie im unendlichen Volumen zu finden ist, aufgehoben, siehe z.B. [64]. Wird auch hier ein Volumen mit sehr langer Ausdehnung in z-Richtung untersucht, so gilt für die Energie des ersten angeregten Zustandes:

$$E_1 = C\exp(-A_{(3)}\sigma)\,, \qquad A_{(3)} := L_t L_x L_y\,. \tag{6.32}$$

In [20] wird dazu die Anregungsenergie E_1 mit den Kopplungen $\beta = 8.0$, $\lambda = 0.0003$ und einer inversen Gitterkonstanten $a^{-1} = 2T_c$ bei vier verschiedenen Querschnittsflächen im Bereich $[2 \times 4^2] \leq A_{(3)} \leq [2 \times 16^2]$ gemessen. Daraus wird

$$\frac{\sigma}{T_c^3} = 0.053(5) \tag{6.33}$$

bestimmt. Dies stimmt im Rahmen der angegebenen Fehler mit dem Ergebnis (6.29) überein. Beim Vergleich der Fehler dieser beiden Ergebnisse ist zu beachten, daß im Fall der 2-Kopplungs-Methode das Produkt aus Gittergröße und Sweepanzahl ungefähr eine Größenordnung kleiner ist.

Histogramm

Für die Parameter der **1**-Reihe wurde die Oberflächenspannung für eine inversen Gitterkonstante $a^{-1} = 2T_c$ ebenfalls aus den Histogrammen der Ordnungsparameter $L_{\varphi,x\mu}$ und $s_{\log}$ bestimmt [19, 49]. Die Bestimmung der Oberflächenspannung aus dem Histogramm eines Ordnungsparameters geht auf Binder [65] zurück.

Dazu ist ein hinreichend großes Gitter zu wählen, so daß sich im Histogramm Spitzen in der Umgebung der Erwartungswerte der reinen Phasen mit ausgeprägten Minima dazwischen entwickeln, siehe Abb. 4.1. Auf hinreichend großem, aber nicht zu großem Volumen und bei geeigneter Gittergeometrie treten in der Umgebung des Minimums praktisch nur Zustände auf, in denen das Volumen in zwei Teilvolumina in verschiedenen Phasen unterteilt ist. Die Wahrscheinlichkeit der zugeordneten Zustände ist direkt mit ihrer freien Energie verknüpft, so daß die Oberflächenspannung aus dem Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten für eine Situation mit und ohne Phasengrenzen bestimmt werden kann

$$\sigma_\Omega = \frac{1}{2L_t L_x L_y} \log\left(\frac{p_{\max}}{p_{\min}}\right)\,. \tag{6.34}$$

Hierbei bezeichnet $p_{\max}/p_{\min}$ das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten des Maximums und des Minimums im Histogramm. Für die Gültigkeit der Formel wird vorausgesetzt, daß L_z groß gegen die

anderen Gitterausdehnungen ist, so daß sich für die Oberfläche der Grenzflächen $A_{(3)} = 2L_tL_xL_y$ ergibt.

Aufgrund der sehr großen Oberflächenspannung bei kleinen Higgsbosonmassen war hier eine Erhöhung der Tunnelraten durch eine multikanonischen Simulation [66] notwendig. Eine weitere Reduktion des Rechenzeitbedarfs konnte durch die Beschränkung von $s_{\log}$ entsprechend Gl. (4.10) erreicht werden. Der $s_{\log}$-Bereich des Histogramms in Abb. 4.1 wurde in überlappende Streifen unterteilt, und die Streifen wurden separat simuliert.

Die Oberflächenspannung wurde in [19, 49] auf zwei verschiedenen Gittern $\Omega_1 = 2 \times 4^2 \times 128$ und $\Omega_2 = 2 \times 8^2 \times 128$ bestimmt und anschließend zu unendlichen Volumen extrapoliert. Als Endergebnis wird

$$\left.\frac{\sigma_\infty}{T_c^3}\right|_1 = 0.83(4)\,, \qquad \text{für } a^{-1} = 2T_c \tag{6.35}$$

angegeben. Der Wert aus (6.30) stimmt hiermit sehr gut überein. Auf dem Gitter Ω_2 ergibt sich für die Oberflächenspannung $\sigma_{\Omega_2}/T_c^3 = 0.80(2)$, dies weicht nicht signifikant von dem Wert σ_∞ ab.

Aufgrund des deutlich größeren statistischen Fehlers der Resultate der 2-Kopplungs-Methode erscheint eine Extrapolation der letztgenannten Ergebnisse zu unendlichem Volumen wenig sinnvoll, zumal die betrachteten Volumina hier auch deutlich größer sind.

Der Vergleich der Resultate der 2-Kopplungs-Methode mit den Resultaten anderer Bestimmungsverfahren hat keinen Hinweis auf große systematische Fehler geliefert, die die Größe des statistischen Fehlers übersteigen. Mit der 2-Kopplungs-Methode in der hier vorgestellten Variante steht somit ein Verfahren zur Bestimmung der Oberflächenspannung zur Verfügung, daß im Vergleich zu den anderen Verfahren wenig Rechenzeit benötigt. Dies liegt vor allem daran, daß in diesem Fall die Metastabilität auf großem Volumen ausgenutzt werden kann und kein Übergang zwischen den Phasen abgewartet werden muß.

Kapitel 7

Latente Wärme

Die latente Wärme eines Phasenübergangs erster Ordnung ist eine weitere den Phasenübergang charakterisierende Größe. Aus der Oberflächenspannung, der latenten Wärme und der kritischen Temperatur kann für den Fall geringer Unterkühlung der symmetrischen Phase die Übergangsrate von der symmetrischen Phase in die Higgsphase angegeben werden, wie schon im Abschnitt 6.1 ausführlich diskutiert. Die freigesetzte latente Wärme führt in der Higgsphase zu einer Wiederaufheizung des Plasmas auf die Temperatur T_r. Ist T_r geringer als die kritische Temperatur T_c, so ergibt sich eine zusätzliche Unterdrückung der Sphaleronübergänge, da der Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes in der Higgsphase mit abnehmender Temperatur ansteigt. Neben der Kenntnis der latenten Wärme und der Temperatur T_f, bei der der Phasenübergang stattfindet, wäre zur Bestimmung von T_r noch die Messung der Wärmekapazität des elektroschwachen Plasmas in der Higgsphase notwendig.

7.1 Messung der latenten Wärme

Die latente Wärme eines Phasenübergangs bezeichnet den Sprung der Energiedichte des Plasmas am Phasenübergang. Die Energiedichte läßt sich aus der Ableitung des Logarithmus der Zustandssumme Z bezüglich der inversen Temperatur T^{-1} bestimmen

$$\epsilon = -\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial[T^{-1}]}\log Z\,. \tag{7.1}$$

Da sich die Temperatur aus der Länge des Simulationsvolumens in t-Richtung zu $T^{-1} = a_t \cdot L_t$ bestimmt, ist die Einführung von verschiedenen Gitterkonstanten a_t und a_s in Zeit- bzw. Raumrichtung notwendig.

Latente Wärme auf isotropem Gitter

Soll dagegen *nur* die latente Wärme $\Delta\epsilon$ bestimmt werden, so kann auch weiterhin mit einer isotropen Gitterkonstanten $a := a_t = a_s$ gearbeitet werden, dazu wird die Größe $\delta := \frac{1}{3}\epsilon - P$ untersucht. Der Druck P ist auch am Phasenübergang stetig, so daß sich die latente Wärme direkt aus dem Sprung von δ bestimmen läßt. Darüberhinaus ist δ als Funktion der Temperatur u.a. in kosmologischen Untersuchungen von Interesse, dies wird im Kapitel 8 genauer beschrieben. Ausgehend von

$$P = T\frac{\partial}{\partial V}\log Z \tag{7.2}$$

wird in [33] auf anisotropem Gitter die Beziehung

$$\begin{aligned}\delta &:= \frac{1}{3}\epsilon - P \\ &= \frac{T^4}{3}\left(\frac{L_t}{L_s}\right)^3\left\langle\left.\frac{\partial S}{\partial[\log a]}\right|_{g_R^2,\lambda_R}\right\rangle\end{aligned} \tag{7.3}$$

hergeleitet. Mit $\tau := -\log(M_W)$, wobei $M_W \approx a \cdot 80$ GeV die Masse des W-Bosons bezeichnet, ergibt sich für δ im SU(2)-Higgs-Modell

$$\begin{aligned}\delta &= T^4 L_t^4\Big[8\frac{\partial\kappa}{\partial\tau}\langle L_{\varphi,x\mu}\rangle \\ &\quad - 6\frac{\partial\beta}{\partial\tau}\langle P_{pl}\rangle - \frac{\partial\lambda}{\partial\tau}\langle Q_x\rangle\Big]\Big|_{g_R^2,\lambda_R}\,.\end{aligned} \tag{7.4}$$

Zur Abkürzung werden die in Gl. (2.8) definierten Operatoren $L_{\varphi,x\mu}$, P_{pl} und Q_x benutzt. Wie in [67] für das Ising-Modell und die reine SU(2)-Eichfeldtheorie diskutiert, enthält Gl. (7.4) divergente Vakuumbeiträge, die bei der Wickrotation vom (3+1)-dimensionalen Minkowskiraum zum vierdimensionalen euklidischen Raum entstehen. Die Gleichung ist somit nur zur Bestimmung von Differenzen in δ zwischen Zuständen bei verschiedenen Temperaturen oder in verschiedenen Phasen physikalisch sinnvoll zu verwenden.

Partielle Ableitungen

Zur Bestimmung der partiellen Ableitungen in Gl. (7.4) wurden entsprechend der Bestimmung der nackten Kopplungen in Kapitel 4 verschiedene Wege beschritten. Die Ableitungen der Kopplungen λ und β wurden aus den 1-Schleifen-Renormierungsgruppengleichungen (4.4) und (4.5) bestimmt. Mit Gl. (4.3) ergibt sich in der betrachteten Schleifenordnung

$$\left.\frac{\partial\beta}{\partial\tau}\right|_{g_R^2,\lambda_R} = \frac{1}{4\pi^2}\,\frac{43}{3} + \ldots \approx 0.363 \qquad (7.5)$$

unabhängig von g^2 und λ. In der Umrechnung von $\frac{\partial}{\partial\tau}\lambda_0$ in die Ableitung $\frac{\partial}{\partial\tau}\lambda$ ist die Ableitung des Hoppingparameters $\frac{\partial}{\partial\tau}\kappa$ zu berücksichtigen.

Die Ableitung des Hoppingparameters wird aus polynomialen Fits an die Werte der kritischen Hoppingparameter in der Umgebung des untersuchten τ-Wertes bestimmt. In den Untersuchungen der **l**- und **h**-Meßreihe in [18, 19] wurden zu diesem Zweck κ_c-Werte in 1-Schleifen-Gitterstörungstheorie bestimmt. In der **m**-Reihe hingegen stehen in den Tabellen 4.1 und 4.2 genügend Simulationsergebnisse für κ_c zur Verfügung, so daß $\frac{\partial}{\partial\tau}\kappa$ hieraus bestimmt werden konnte. Für $a^{-1} = 2T_c$ wurde das Resultat der Simulation mit beschränktem Ordnungsparameter verwendet. Für die feineren Gitter $a^{-1} \geq 3T_c$ kann aufgrund des beschränkten Hauptspeichers auf der CRAY-YMP die Bestimmung des kritischen Hoppingparameters nicht mehr mit 64-Bit-Arithmetik durchgeführt werden, so daß diese Hoppingparameter mit der einfacheren 2-Kopplungs-Methode auf der Quadrics bestimmt sind.

Zur Bestimmung von $\frac{\partial}{\partial\tau}\kappa$ wurden Fitkurven zweiter und dritter Ordnung in τ verwendet und durch Vergleich der Fitkurven wurde eine Abschätzung für den systematischen Fehler erhalten. Die statistischen Fehler wurden aus 500 normalverteilten Werten bestimmt

$$\left.\frac{\partial\kappa}{\partial\tau}\right|_{\mathrm{m2}} = -1.00(10)\cdot 10^{-3}\,,$$
$$\left.\frac{\partial\kappa}{\partial\tau}\right|_{\mathrm{m4}} = -0.34(2)\cdot 10^{-3}\,. \qquad (7.6)$$

Hierin sind beide Fehler berücksichtigt. Die Indizes m2 und m4 stehen für die Messungen der **m**-Reihe mit $a^{-1} = 2T_c$ bzw. $4T_c$. Die partiellen Ableitungen $\frac{\partial}{\partial\tau}\lambda$ ergeben sich damit zu

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial\lambda}{\partial\tau}\right|_{\mathrm{m2}} &= 21.76\cdot 10^{-6} + 4.66\cdot 10^{-3}\,\frac{\partial\kappa}{\partial\tau}\\ &= 17.09(47)\cdot 10^{-6}\,,\\ \left.\frac{\partial\lambda}{\partial\tau}\right|_{\mathrm{m4}} &= 19.75\cdot 10^{-6} + 4.91\cdot 10^{-3}\,\frac{\partial\kappa}{\partial\tau}\\ &= 18.08(10)\cdot 10^{-6}\,. \qquad (7.7)\end{aligned}$$

Bestimmung der Erwartungswerte

Das Vorzeichen der latenten Wärme $\Delta\epsilon$ ist durch die Differenz der Energiedichten der symmetrischen und der Higgsphase ($\epsilon_{\mathrm{sym}} - \epsilon_{\mathrm{Higgs}}$) definiert, so daß sich ein positiver Wert für die latente Wärme ergibt, wenn beim Übergang von der Hochtemperatur- in die Tieftemperaturphase Energie frei wird.

Zur Berechnung der latenten Wärme ist die Bestimmung der Erwartungswerte der Operatoren $L_{\varphi,x\mu}$, P_{pl} und Q_x in beiden Phasen bei $T = T_c$ notwendig. Zur separaten Vermessung der Phasen wurde die Metastabilität des Modells auf ausreichend großem Gitter ausgenutzt. Die Gittergrößen und die nackten Kopplungen, die zur Bestimmung der Erwartungswerte benutzt wurden, sind in der Tabelle A.8 wiedergegeben. Mit der Taylorprojektion, siehe Abschnitt 3.5, wurden die Simulationsergebnisse zu den Hoppingparametern κ_+, κ_c und κ_- extrapoliert. Mit κ_+ und κ_- werden hier die

obere und untere Grenze des Fehlerintervalls des kritischen Hoppingparameters bezeichnet. Für die Projektion wurde jeweils das Taylorpolynom der höchsten Ordnung benutzt, für das sich aus den Simulationsdaten noch signifikante Koeffizienten bestimmen lassen. Die derart bestimmten Erwartungswerte sind in der Tabelle A.9 zu finden. An dieser Stelle ist anzumerken, daß die Werte der Higgsphase erheblich empfindlicher auf die Verschiebungen des Hoppingparameters reagieren als die Werte der symmetrischen Phase.

Aus der Gl. (7.4) ergibt sich für die latente Wärme bei den beiden untersuchten Gitterkonstanten

$$\left.\frac{\Delta\epsilon}{T_c^4}\right|_{\mathrm{m2}} = 0.240(30+4)\,, \qquad \left.\frac{\Delta\epsilon}{T_c^4}\right|_{\mathrm{m4}} = 0.28(3+9)\,. \tag{7.8}$$

Die erste Zahl in der Klammer setzt sich aus den statistischen Fehlern der Erwartungswerte in Tabelle A.8 und den Fehlern der partiellen Ableitungen zusammen. Dieser Wert wird deutlich durch den Fehler der partiellen Ableitung $\frac{\partial}{\partial\tau}\kappa$ in Gl. (7.6) dominiert. Als zweiter Wert ist in der Klammer die Differenz $\frac{1}{2}(\Delta\epsilon|_{\kappa_+}-\Delta\epsilon|_{\kappa_-})/T_c^4$ angegeben, also eine Abschätzung des Fehlers, der sich aus der Unkenntnis der genauen Lage des Phasenübergangs ergibt. In der Messung mit $a^{-1}=4T_c$ dominiert dieser Fehler deutlich über alle anderen Fehlerquellen, so daß zur Reduktion der Unsicherheit der latenten Wärme vor allem ein Wert des kritischen Hoppingparameters mit geringerer Unsicherheit benötigt wird. Im Rahmen ihrer großen Meßunsicherheit stimmen die beiden Meßwerte überein.

7.2 Clausius-Clapeyron-Gleichung

Die latente Wärme eines Phasenübergangs erster Ordnung kann auch mit Hilfe der *Clausius-Clapeyron-Gleichung* bestimmt werden, wie in [68, 13] ausgeführt. Dazu wird die freie Energie F des Modells als Funktion der Temperatur T und einer dem eichinvarianten Operator ρ^2 zugeordneten Quelle J aufgefaßt. Die Funktion $J_c(T)$ wird als der Wert der Quelle definiert, für den das System bei vorgegebener Temperatur kritisch wird. Am kritischen Punkt sind die freien Energien der beiden Phasen gleich

$$F_{\mathrm{sym}}(T,J_c(T)) - F_{\mathrm{Higgs}}(T,J_c(T)) = 0\,. \tag{7.9}$$

Durch totale Ableitung der Gleichung nach der Temperatur erhält man hieraus die Clausius-Clapeyron-Gleichung des elektroschwachen Phasenübergangs. Der darin auftretende Term $\mathrm{d}J_c(T)/\mathrm{d}T$ kann in einer Dimensionsanalyse in der niedrigsten Ordnung der Störungsreihe durch die Masse des Higgsbosons bei $T=0$ ausgedrückt werden. In den durch die Wirkung (2.6) fixierten Konventionen ergibt sich

$$\Delta\epsilon \simeq -\kappa M_H^2 \Delta\rho\,. \tag{7.10}$$

In den Simulationen mit $a^{-1}=2T_c$ der **m**-Reihe sind die für die Gewichtung notwendigen Daten für den Operator ρ_x^2 leider nicht aufgenommen worden, so daß hier nur die Werte der direkten Messungen bei $\kappa = 0.12865$ und 0.12866 zur Verfügung stehen, siehe Tabellen A.8 und A.10. Wie die Hysteresekurven in Abbildung 4.2 zeigen, verhalten sich die Erwartungswerte der Operatoren ρ_x^2 und $L_{\varphi,x\mu}$ in der Umgebung des kritischen Punktes ähnlich. Weiter zeigt die Untersuchung der Taylorprojektion des Operators $L_{\varphi,x\mu}$ in Abb. 3.5, daß eine lineare Interpolation der direkten Messungen bei $\kappa = 0.12865$ und 0.12866 zu $\kappa_c = 0.1286565$ einen zu geringen Wert für $L_{\varphi,x\mu}$ liefert. Entsprechend wird ein ρ_x^2-Wert bei κ_c in der Higgsphase durch lineare Interpolation der beiden $\rho^2_{x,\mathrm{Higgs}}$-Meßwerte bestimmt. Zur Korrektur der vernachlässigten Krümmung wird hierzu die Differenz aus dem Wert der $L_{\varphi,x\mu}$-Taylorprojektion und der linearen Interpolation der direkten $L_{\varphi,x\mu}$-Messungen in Abb. 3.5 an der Stelle κ_c addiert. Als Fehler für $\langle\rho^2_{x,\mathrm{Higgs}}\rangle_{\kappa_c}$ wird diese Differenz benutzt. In der symmetrischen Phase ist die Krümmung deutlich geringer, hier genügt es, linear zu interpolieren und einen etwas größeren Wert für den Fehler zu benutzen. Es ergibt sich

$$\langle\rho^2_{x,\mathrm{Higgs}}\rangle_{\kappa_c} = 5.18(6)\,, \qquad \langle\rho^2_{x,\mathrm{sym}}\rangle_{\kappa_c} = 2.941(2)\,. \tag{7.11}$$

Bei $a^{-1} = 4T_c$ werden die Resultate der Taylorprojektion in Tabelle A.10 benutzt. Zusammen mit den M_H-Werten in Tabelle A.3 ergibt sich aus Gl. (7.10) für die latente Wärme

$$\left.\frac{\Delta\epsilon}{T_c^4}\right|_{\mathrm{m2}} = 0.281(19)\,, \qquad \left.\frac{\Delta\epsilon}{T_c^4}\right|_{\mathrm{m4}} = 0.31(12)\,. \tag{7.12}$$

Dies stimmt im Rahmen der Fehler mit dem Resultat (7.8) überein.

Kapitel 8

Thermodynamik des SU(2)-Higgs-Modells

Die Kenntnis der thermodynamischen Zustandsgleichung $P = P(\epsilon)$ des Universums ist für viele kosmologische Fragestellungen von großem Interesse. So wird der Zusammenhang zwischen der Energiedichte des Universums und dem Skalenfaktor R_{RW} der Robertson-Walker-Metrik durch die Zustandsgleichung bestimmt [69]. Für ein ideales relativistisches Gas masseloser Bosonen (reine Strahlung) ergibt sich aus der Dispersionsrelation $E^2 = k^2$ die Zustandsgleichung $P(\epsilon) = \frac{1}{3}\epsilon$, siehe z.B. [70]. Ist diese Beziehung erfüllt, so wird von einem strahlungsdominierten Universum gesprochen, für den Skalenfaktor gilt dann $\epsilon \propto R_{\mathrm{RW}}^{-4}$.

8.1 Energiedichte und Druck

Zur Bestimmung der Zustandsgleichung sind Untersuchungen auf einem asymmetrischen Gitter mit $a_t \neq a_s$ notwendig, wie es bereits in den Gleichungen (7.1) und (7.2) deutlich wurde. Da im Standardmodell für $T \gg T_c$ eine Zustandsgleichung $P(\epsilon) = \frac{1}{3}\epsilon$ erwartet wird, besteht auch an der methodisch erheblich einfacheren Bestimmung der Differenz $\delta := \frac{1}{3}\epsilon - P$ ein physikalisches Interesse. Eine Verletzung der Relation $\delta = 0$ ist direkt auf den Einfluß von Teilchenmassen und Wechselwirkungen zurückzuführen, daher kann die Gültigkeit dieser Relation nur für Temperaturen $T \gg T_c$ erwartet werden.

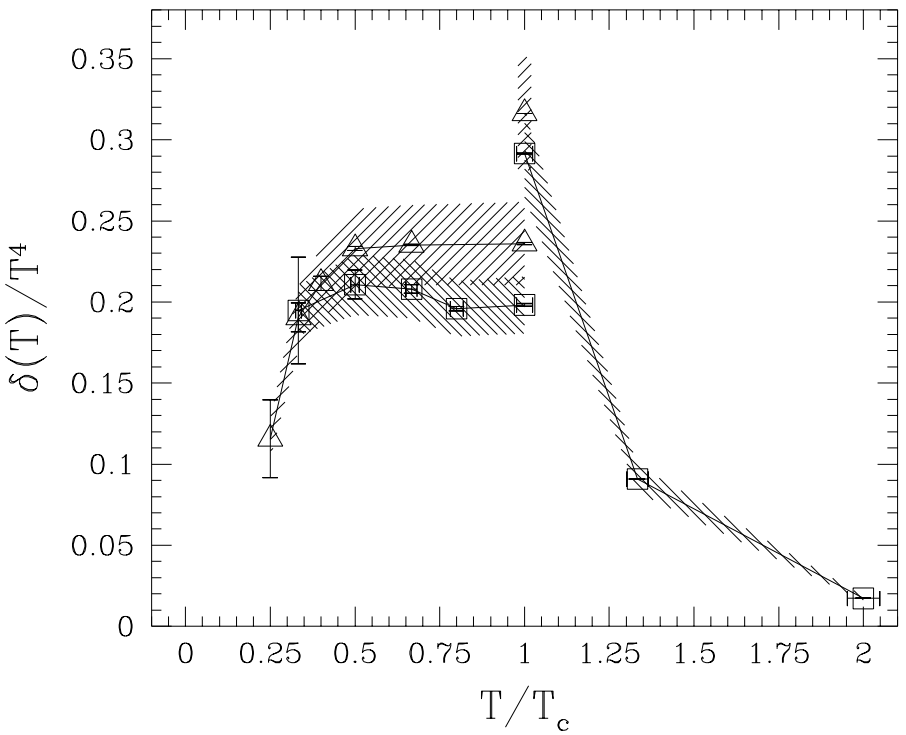
Zur Messung der thermodynamischen Größe δ wurden die Parameter der **m**-Meßreihe gewählt. Wie bereits ausgeführt, wurden dafür isotrope Gitter mit $a_t = a_s$ benutzt, so daß die Temperatur durch die Anzahl der Gitterpunkte in Zeitrichtung bestimmt wird: $T = (a\, L_t)^{-1}$. Aus den beiden benutzten Werten der inversen Gitterkonstanten $a^{-1} = 2T_c$ und $4T_c$ ergeben sich zusammen mit der Bedingung $L_t \geq 2$ die folgenden diskreten Temperaturwerte $T = 2T_c \cdot n^{-1}$ bzw. $4T_c \cdot n^{-1}$ mit ganzzahligem $n \geq 2$. Die Bestimmungsgleichung

$$\frac{\delta(T)}{T^4} = L_t^4 \Big[8 \frac{\partial \kappa}{\partial \tau} \langle L_{\varphi,x\mu} \rangle - 6 \frac{\partial \beta}{\partial \tau} \langle P_{pl} \rangle - \frac{\partial \lambda}{\partial \tau} \langle Q_x \rangle \Big] \Big|_{g_R^2, \lambda_R} \quad (8.1)$$

wurde im Abschnitt 7.1 bereits ausführlich diskutiert. Die numerischen Werte der partiellen Ableitungen sind in den Gleichungen (7.5) bis (7.7) und die gemessenen Erwartungswerte der Größen $L_{\varphi,x\mu}$, P_{pl} und Q_x bei den verschiedenen L_t-Werten sind in der Tabelle A.11 angegeben. Zur Entfernung der erwähnten divergenten Vakuumbeiträge werden die Resultate des Gitters der Meßreihe mit maximalem L_t subtrahiert. Diese Wahl des Subtraktionspunktes ist durch $\lim_{T \searrow 0}[T^{-4}\delta(T)] = 0$ motiviert.

Das Ergebnis für δ als Funktion der Temperatur wird in der Abbildung 8.1 gezeigt, dabei ist mit T^{-4} normiert worden, so daß sich dimensionslose Werte ergeben. Insgesamt sind in der Abbildung drei verschiedene Fehler eingetragen. Zum einen wird die Fortpflanzung der statistischen Fehler der

Abbildung 8.1: *Das Resultat der Messung der Größe $\delta(T) := \frac{1}{3}\epsilon - P$. Die Meßwerte bei $a^{-1} = 2T_c$ werden durch die Dreiecke angegeben, die bei $a^{-1} = 4T_c$ durch die Quadrate. Die verschiedenen Fehler werden im Text erläutert.*



Meßgrößen aus Tabelle A.11 durch senkrechte Fehlerbalken angegeben. Durch die Wahl des Subtraktionspunktes ergeben sich hierfür vor allem bei kleinen Temperaturen große Werte. Durch den schraffierten Bereich wird der Einfluß der Fehler der partiellen Ableitung $\frac{\partial}{\partial\tau}\kappa$ aus Gl. (7.6) angegeben. Dies betrifft alle Meßpunkte einer Meßreihe gleichmäßig, so daß sich hieraus im wesentlichen eine Unsicherheit in der Amplitude ergibt, die Form der Kurve bleibt aber weitgehend unbeeinflußt. Als drittes ist der Einfluß des Fehlers des kritischen Hoppingparameters zu berücksichtigen. Unter Benutzung der Ergebnisse für die W-Bosonmasse bei verschiedenen Werten des Hoppingparameters in der Tabelle A.3 wurde dieser in eine Unsicherheit der kritischen Temperatur T_c umgerechnet, die durch die waagerechten Fehlerbalken dargestellt ist. Für diesen Fehler ergeben sich in den Messungen mit $a^{-1} = 4T_c$ bei hohen Temperaturen große Werte. Auch von dieser Unsicherheit sind alle Punkte einer Kurve gleichmäßig betroffen, sie führt zu einer Stauchung oder Streckung der gemessenen Kurve und läßt Ihre Form invariant.

Bevor die physikalischen Aspekte des Ergebnisses diskutiert werden, ist anzumerken, daß sich keine signifikanten Unterschiede zwischen den Resultaten der verschiedenen a-Werte ergeben. Die Form der Kurve wird gut reproduziert.

Das interessanteste Resultat dieser Untersuchung ist der extrem starke Abfall der Funktion δ/T^4 in der symmetrischen Phase mit ansteigender Temperatur. Im Bereich von T_c bis $2T_c$ ist ein Abfall von einer Größenordnung zu beobachten, bei $T = 2T_c$ ist der Wert bereits so weit abgefallen, daß $\epsilon \approx 3P$ gilt und für Temperaturen oberhalb von $2T_c$ von ei-

nem strahlungsdominierten Plasma gesprochen werden kann.

Weiterhin wird durch die großen Unterschiede zwischen den Steigungen im metastabilen Bereich die extreme Empfindlichkeit der latenten Wärme in Gl. (7.8) auf Verschiebungen des Hoppingparameters verständlich.

Tangenten

Eine geringe Verschiebung des Hoppingparameters führt zu einer deutlichen Änderung der Gitterkonstanten, wie die Untersuchung der renormierten Massen und Kopplungen im Kapitel 5 ergibt. Eine Änderung der renormierten Kopplungen g_R^2 und R_{HW} konnte dabei im Rahmen der kleinen statistischen Fehler nicht nachgewiesen werden. Ist das räumliche Volumen so groß gewählt, daß dieses keinen bedeutenden Einfluß auf das Simulationsergebnis hat, so führt eine Änderung der Gitterkonstanten im wesentlichen zu einer Änderung der Temperatur, und es sollte möglich sein, die partielle Ableitung $\frac{\partial}{\partial T}\delta/T^4$ aus der partiellen Ableitung $\frac{\partial}{\partial \kappa}\delta/T^4$ in guter Näherung zu bestimmen

$$\frac{\partial}{\partial t_r}\left(\frac{\delta}{T^4}\right) \approx \left(\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t_r}\right)\frac{\partial}{\partial \kappa}\left(\frac{\delta}{T^4}\right), \qquad t_r := \frac{T}{T_c}. \tag{8.2}$$

Für die Diskussion der Ableitung $\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t_r}$ wird der Gitterabstand als Funktion des Hoppingparameters eingeführt. Dabei wird $a(\kappa_c) = 1$ gesetzt, für die Temperatur gilt

$$T(\kappa) = \frac{1}{L_t \cdot a(\kappa)}. \tag{8.3}$$

Sind die renormierten Kopplungen vom Hoppingparameter unabhängig, so ist es auch der Wert der kritischen Temperatur. In Einheiten von $a(\kappa_c) = 1$ gilt

$$L_{t,c} := T_c^{-1}(\kappa_c) \approx T_c^{-1}(\kappa). \tag{8.4}$$

Damit

$$\frac{\mathrm{d}t_r}{\mathrm{d}\kappa} = -\frac{L_{t,c}}{L_t}\frac{1}{(a(\kappa))^2}\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}\kappa},$$

$$\Longrightarrow \left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t_r}\right|_{\kappa_c} = -\frac{1}{t_r}\left(\left.\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}\kappa}\right|_{\kappa_c}\right)^{-1}. \tag{8.5}$$

Der Wert der obigen Ableitung der Gitterkonstanten läßt sich aus der Änderung der W-Bosonmasse bei Verschiebung des Hoppingparameters abschätzen

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}\kappa}\right)^{-1}\Big|_{a^{-1}=2T_c} &= 0.00105(10),\\ \left(\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}\kappa}\right)^{-1}\Big|_{a^{-1}=4T_c} &= 0.00209(17).\end{aligned} \tag{8.6}$$

Unter der Annahme, daß die Kurven konstanter Physik parallel verlaufen, wenn der Hoppingparameter geringfügig verschoben wird, d.h. daß sich die partiellen Ableitungen der nackten Kopplungen in dem untersuchten κ-Intervall nur unwesentlich verändern, gilt

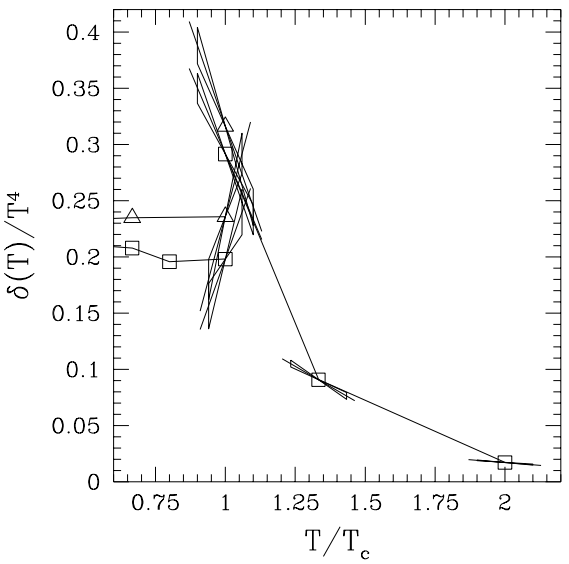
$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial \kappa}\left(\frac{\delta}{T^4}\right)\\ &= \frac{L_t^4}{3}\left[8\frac{\partial\kappa}{\partial\tau}\left\langle\frac{\partial}{\partial\kappa}L_{\varphi,x\mu}\right\rangle - 6\frac{\partial\beta}{\partial\tau}\left\langle\frac{\partial}{\partial\kappa}P_{pl}\right\rangle\right.\\ &\qquad \left. - \frac{\partial\lambda}{\partial\tau}\left\langle\frac{\partial}{\partial\kappa}Q_x\right\rangle\right].\end{aligned} \tag{8.7}$$

Die partiellen Ableitungen der Größen $L_{\varphi,x\mu}$, P_{pl} und Q_x werden mit den im Abschnitt 3.5 beschriebenen Methoden bestimmt. Auch hier wird im weiteren das Resultat des Gitters mit maximalem L_t abgezogen. Im Bereich $T \geq T_c$ ergeben sich signifikant von Null verschiedene Tangentensteigungen, die Ergebnisse werden in der Abb. 8.2 dargestellt.

Im Rahmen der eingetragenen Fehler ergibt sich eine sinnvolle Übereinstimmung der Tangentensteigung mit der gemessenen Kurvenform. Dennoch fällt auf, daß sich für alle Tangenten geringfügig zu große Werte für die Steigung ergeben. Dies kann durch die verschiedenen Annahmen verursacht sein oder aber auch ein rein statistischer Effekt sein. So wurde z.B. für alle Tangenten einer Kurve der gleiche Wert für die partiellen Ableitungen der nackten Kopplungen benutzt.

Vor dem Hintergrund des festgestellten starken Abfalls der Funktion δ/T^4 für $T \geq T_c$ ist die sehr gute Übereinstimmung der stark negativen Tangentensteigungen am kritischen Punkt in der symmetrischen Phase beachtenswert. Somit kann auch aus den Daten bei $a^{-1} = 2T_c$ auf einen raschen Über-

Abbildung 8.2: *Tangenten der Funktion $\delta(T)/T^4$. Die Tangentensteigung wurde mit Gl. (8.2) bestimmt. Der Fehlerbereich der Tangentensteigung wird durch die langgestreckten Dreiecke angegeben. Für $T < T_c$ ist die gemessene Tangentensteigung immer mit Null verträglich. Die Länge der Tangenten hat keine Bedeutung. Die Meßpunkte bei $a^{-1} = 2T_c$ werden wiederum durch Dreiecke, die bei $a^{-1} = 4T_c$ durch Quadrate angegeben.*



gang zu einem strahlungsdominierten Plasma geschlossen werden.

8.2 Vakuumerwartungswert

Die Größe der Sphaleronrate in der Higgsphase ist von entscheidender Bedeutung für die elektroschwache Baryogenese, wie in der Einleitung dargestellt. Ist diese Übergangsrate zu groß, so wird eine während des Phasenübergangs erzeugte Baryonenzahl während der Abkühlung in der Higgsphase wieder ausgewaschen, und die Baryonenasymmetrie des Universums kann nicht im Rahmen der elektroschwachen Theorie erklärt werden.

Nach Gleichung (1.1) ist die Energie am Sattelpunkt direkt mit dem Vakuumerwartungswert v des Skalarfeldes verknüpft, so daß sich aus Gleichung (1.2) die folgende notwendige Bedingung für die elektroschwache Baryogenese ergibt

$$\frac{v(T_r)}{T_r} \geq \frac{45\,g}{4\pi\,B(\lambda/g^2)}\,. \tag{8.8}$$

Durch die während des Phasenübergangs freigesetzte latente Wärme kommt es zu einer Wiederaufheizung des Plasmas und somit liegt die Temperatur T_r nach Abschluß des Phasenübergangs zwischen der Temperatur T_f bei der der Phasenübergang stattfindet und der kritischen Temperatur T_c. Das Ziel dieses Abschnitts ist es das qualitative Verhalten des Verhältnisses v/T als Funktion der Temperatur zu bestimmen.

Ein renormierter Vakuumerwartungswert v_R kann bei der Temperatur $T=0$ durch die Relation

$$v_R := 2\frac{M_W}{g_R} \tag{8.9}$$

definiert werden. Aus den Werten der Tabellen A.3 und A.4 ergibt sich

$$\begin{aligned} v_R|_{\mathrm{m2}} &= 1.489(6)\,, \\ v_R|_{\mathrm{m4}} &= 0.723(10)\,. \end{aligned} \tag{8.10}$$

Dabei werden auch hier durch die Indizes m2 und m4 die Messungen der **m**-Reihe bei $a^{-1} = 2T_c$ bzw. $4T_c$ bezeichnet und die Unsicherheit des kritischen Hoppingparameters ist in beiden Fällen nicht berücksichtigt worden. Eine Messung der W-Bosonmasse als Funktion der Temperatur ist numerisch sehr aufwendig, wir wollen daher aus den Erwartungswerten von ρ_x^2 einen Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes definieren

$$v(T) := \sqrt{2\kappa\left(\rho_x^2(T) - \rho_{x,\mathrm{sym}}^2(T_c)\right)}\,. \tag{8.11}$$

Hier wird mit $\rho_{x,\mathrm{sym}}^2(T_c)$ der Erwartungswert von ρ_x^2 in der symmetrischen Phase bei $T = T_c$ bezeichnet.

Wie in Abschnitt 7.2 beschrieben, wurden für $a^{-1} = 2T_c$ direkt am Phasenübergang keine ρ_x^2-Werte bestimmt, daher müssen auch hier die Werte aus Gl. (7.11) benutzt werden. Die weiteren Werte für ρ_x^2 sind in der Tabelle A.12 angegeben, und es ergibt sich

$$\begin{aligned} v(T=0)\big|_{\mathrm{m2}} &= 1.47031(19)\,, \\ v(T=0)\big|_{\mathrm{m4}} &= 0.71424(10)\,. \end{aligned} \tag{8.12}$$

Bei beiden Gitterkonstanten weicht $v(T=0)$ nur geringfügig vom Wert des renormierten Vakuumerwartungswertes ab. Die Abweichung ist in beiden Fällen kleiner als 1.3%, und für $a^{-1} = 4T_c$ ist der statistische Fehler von gleicher Größe wie die Abweichung. In der Erwartung, daß die Definition (8.11) eine gute Approximation des renormierten Vakuumerwartungswertes darstellt, wird im weiteren das Verhalten des Verhältnisses v/T in Abhängigkeit von der Temperatur diskutiert.

In der Abbildung 8.3 wird das Ergebnis für $v(T)/T$ angegeben, und es zeigt sich der erwartete Anstieg der Funktion v/T wenn das Plasma in der Higgsphase abgekühlt wird. Interessant ist auch der nichtverschwindende Vakuumserwartungswert in der symmetrischen Phase bei $T > T_c$. Wie schon in der Untersuchung von δ/T^4, so ist auch hier zwischen den Meßwerten bei $a^{-1} = 2T_c$ und $4T_c$ kein signifikanter Unterschied zu erkennen. In der Abbildung ist außerdem die Übergangstemperatur T_f, bis zu der sich das Plasma in der symmetrischen Phase vor dem Eintritt des Phasenübergangs abkühlt, eingetragen. Der Wert von T_f wurde unter der Annahme einer dünnen Blasenwand mit der Gleichung (6.5) bestimmt, und die Bedingung $\Delta F/T_c = 106$ aus [60] führt auf $T_f = 0.980(4) \cdot T_c$. Die Gültigkeit der obigen Annahme wird im Abschnitt 9.2 genauer diskutiert.

Das Verhältnis v/T steigt bei einer Abkühlung von T_c bis T_f um etwas 10% an. Wird die Wiederaufheizung durch die freiwerdende latente Wärme berücksichtigt, so ist in der Higgsphase nur eine geringe Reduktion der Sphaleronrate durch die Unterkühlung zu erwarten.

Wird in die Definition (8.9) der Meßwert für m_W in der Higgsphase bei $T \approx T_c$ aus Tabelle 5.1 eingesetzt, so ergibt sich bei $a^{-1} \approx 2T_c$

$$v_R(T) = 0.783(14) \qquad \text{für } T = 1.0062(9)T_c\,. \tag{8.13}$$

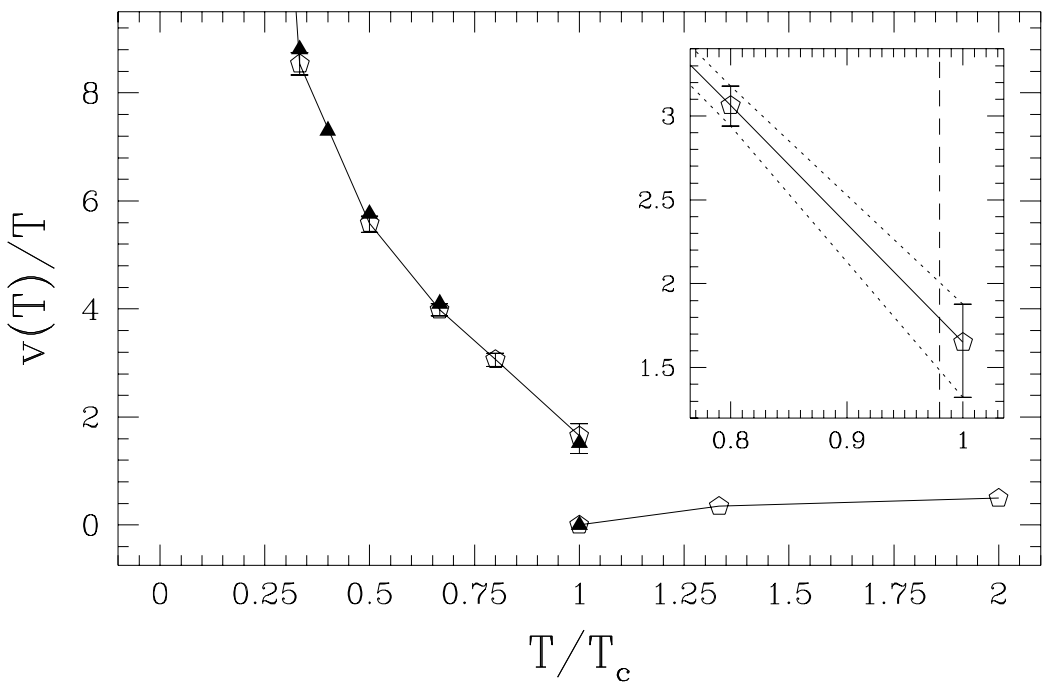
Bei $a^{-1} = 2T_c$ ergibt sich aus (7.11)

$$v(T_c) = 0.759(10)\,. \tag{8.14}$$

Wird zur Korrektur für $T \neq T_c$ der Wert $v_R(T)$ entsprechend der Abbildung um $\approx 5\%$ erhöht, so ergibt sich ein signifikanten Unterschied zwischen den beiden Definitionen. Bei gleicher Temperatur beträgt der Unterschied zwischen den beiden v-Werten $\approx 10\%$, so daß dennoch eine qualitative Übereinstimmung der Resultate gegeben ist, und der Vergleich somit die Annahme, daß der renormierten Vakuumerwartungswert v_R für $T \leq T_c$ gut durch $v(T)$ approximiert wird, unterstützt.

Die Untersuchungen dieses Abschnitts lassen insgesamt nur eine geringe Stabilisierung der Baryonenasymmetrie gegen Auswaschung durch die Unterkühlung der symmetrischen Phase erwarten.

Abbildung 8.3: *Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes als Funktion der Temperatur in der* $\mathbf{m}$*-Reihe. Die Meßwerte bei* $a^{-1}=2T_c$ *werden durch Dreiecke und die bei* $a^{-1}=4T_c$ *durch Fünfecke angegeben. Die Fehlerbalken geben den Einfluß der Unsicherheit des kritischen Hoppingparameters an, weitere Fehlerquellen sind vernachlässigbar gering. Das kleine Bild gibt die Werte in der Nähe des Phasenübergangs vergrößert wieder, durch die senkrechte Linie wird die abgeschätzte Unterkühlung bis zum Eintritt des Phasenübergangs angegeben.*



Kapitel 9

Diskussion

In der vorliegenden Arbeit wird eine umfassende numerische Studie des elektroschwachen Phasenübergangs vorgestellt. In den Simulationen wird dazu das im Vergleich zum Standardmodell konzeptionell einfachere SU(2)-Higgs-Modell benutzt, das die wesentlichen Elemente der Dynamik des Phasenübergang enthält.

9.1 Zusammenfassung

Durch die Benutzung von Spiegelungsalgorithmen für das Skalarfeld kann eine dramatische Reduktion der Autokorrelation — ein Faktor der Größe $\mathcal{O}(1000)$ im Vergleich zu herkömmlichen Metropolisalgorithmen — erreicht werden, siehe dazu [39] und Abschnitt 3.3 dieser Arbeit. Durch diese algorithmische Verbesserung konnte die vorhandenene Rechnerkapazität erheblich effektiver genutzt werden, so daß der volle Umfang dieser Untersuchung des Phasenübergangs erst möglich geworden ist.

Zur Bestimmung der Lage eines Phasenübergangs erster Ordnung im Parameterraum wurden zwei neue Methoden vorgestellt. Dazu wird durch die Benutzung unterschiedlicher Werte der nackten Kopplungen in verschiedenen Teilen des Volumens oder durch die Einschränkung eines Ordnungsparameters auf den flachen Bereich zwischen den Spitzen des Histogramms eine Mischkonfiguration erzwungen. In den Simulationen mit beschränktem Ordnungsparameter wurde das Verhalten der kritischen Kopplung bei Veränderung des Volumens für das SU(2)-Higgs-Modell detailliert studiert. Die numerischen Ergebnisse legen eine exponentielle Abhängigkeit des kritischen Hoppingparameters von der räumlichen Ausdehnung des Simulationsvolumens nahe.

Werden die nackten Parameter aus den Renormierungsgruppengleichungen in 1-Schleifenordnung bestimmt, so ist eine erstaunlich geringe Abhängigkeit der renormierten Massen und Kopplungen von der Gitterkonstanten und dem räumlichen Volumen festzustellen. Aus diesen Resultaten wird die kritische Temperatur T_c des Phasenübergangs mit großer Genauigkeit bestimmt. Einen weiteren Untersuchungsschwerpunkt bildet die Messung der Oberflächenspannung und der latenten Wärme des Phasenübergangs.

Die thermodynamische Größe $\delta := \frac{1}{3}\epsilon - P$ wurde im Temperaturbereich $\frac{1}{4}T_c \leq T \leq 2T_c$ gemessen. Es ergibt sich ein bemerkenswerter Abfall für $T > T_c$, so daß für $T \geq 2T_c$ von einem strahlungsdominierten Plasma gesprochen werden kann und $\epsilon \approx 3P$ gilt. Die untersuchte Temperaturabhängigkeit des Vakuumerwartungswertes des Skalarfeldes läßt nur eine geringe zusätzliche Unterdrückung der Sphaleronrate durch die Unterkühlung erwarten.

Bevor die Resultate dieser Untersuchung mit den Resultaten anderer Zugänge verglichen werden, sollen die wichtigsten Eigenschaften des elektroschwachen Phasenübergangs der **l**-, **m**- und **h**-Meßreihe zusammengefaßt werden.

9.2 Eigenschaften des Phasenübergangs

Mit dem hier vorgestellten numerischen Zugang ist der elektroschwache Phasenübergang in der letzten Zeit ausführlich studiert worden. An dieser Stelle wird ein Überblick über wichtige Eigenschaften des Phasenübergangs gegeben. Dabei werden neben den Ergebnissen dieser Arbeit auch Resultate aus [19, 20, 22] zitiert. Die numerischen Werte werden in der Tabelle A.13 zusammengefaßt.

Kritische Temperatur

Die kritische Temperatur konnte in allen Meßreihen mit großer Genauigkeit bestimmt werden. In der **l**- und der **h**-Meßreihe wurde dies für die inversen Gitterkonstanten $a^{-1} = 2T_c$ und $3T_c$ durchgeführt, in der **m**-Reihe wurde der Einfluß der Gitterkonstanten umfassender studiert und zusätzlich noch $a^{-1} = 4T_c$ und $5T_c$ betrachtet. Da sich in der letztgenannten Reihe alle Meßdaten gut durch die Annahme von Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ beschreiben lassen, erscheint es sinnvoll, auch in den anderen Reihen die Daten zu $a \rightarrow 0$ zu extrapolieren. Das Ergebnis ist in der Abbildung 9.1 dargestellt. Der Fehler der Extrapolation wurde aus den Fehlern der Meßdaten mit Hilfe normalverteilter Zufallszahlen bestimmt.

Unterkühlung

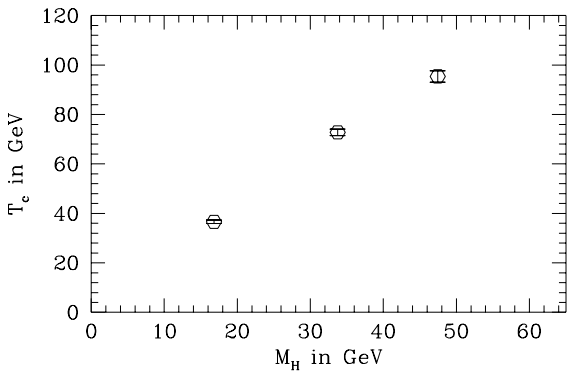
Im Abschnitt 6.1 wird die Dynamik des Phasenübergangs unter der Annahme einer dünnen Blasenwand diskutiert. An dieser Stelle wollen wir nun auf diese Diskussion zurückkommen und die Unterkühlung bis zum Eintritt des Phasenübergangs in dieser Näherung in allen Meßreihen bestimmen. Zur Bestimmung des Übergangspunktes wird hier die Bedingung $\Delta F/T_c = 106$ aus [60] benutzt. In der Abbildung 9.2 werden der Laplace-Radius $R_{c,L}$ der Blasen und die Übergangstemperatur T_f dargestellt.

Zur Untersuchung der Frage, ob die Annahme einer dünnen Blasenwand zu einer verläßlichen Abschätzung der Übergangstemperatur führt, soll daß Verhältnis aus dem Laplace-Radius und der größten Korrelationslänge ξ_c bei $T = T_c$ geprüft werden. In allen Meßreihen ergibt sich ξ_c aus der Higgsbosonmasse in der Higgsphase zu $T_c \xi_c \approx \mathcal{O}(5)$, was in der Abbildung durch den schraffierten Bereich angegeben wird. Für $M_H \approx 17$ GeV ist die Annahme einer dünnen Blasenwand offensichtlich nicht mehr gültig, aber mit zunehmender Higgsmasse sind in dieser Näherung bessere Ergebnisse zu erwarten.

In der Abbildung ist neben den Ergebnissen der Gittersimulation auch eine Kurve für die Unterkühlung aus [8] eingetragen. Diese Kurve wurde perturbativ in 1-Schleifenordnung bestimmt und ihr qualitatives Verhalten stimmt mit den Meßpunkte überein.

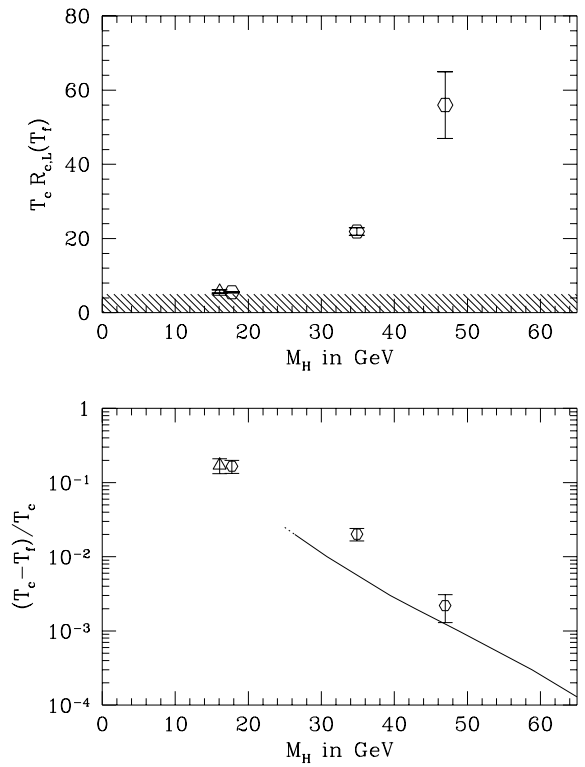
Für eine Higgsmasse $M_H \approx 17$ GeV sind die erforderlichen Daten für die inversen Gitterabstände $a^{-1} = 2T_c$ und $3T_c$ bestimmt worden. Der Laplace-Radius* und die Temperatur T_f stimmen für beide

Abbildung 9.1: *Kritische Temperatur des Phasenübergangs in GeV. Die angegebenen Resultate sind zu $a \rightarrow 0$ extrapoliert. In den Punkten bei $M_H = 17$ GeV und 48 GeV konnte die Unsicherheit des kritischen Hoppingparameters nicht berücksichtigt werden, es ist daher nur der statistische Fehler angegeben.*



*Bemerkung: Der Laplace-Radius $R_{c,L}$ ist auch dann wohldefiniert, wenn er deutlich vom kritischen Blaseradius abweicht.

Abbildung 9.2: *Laplace-Radius und Unterkühlung des Plasmas bis zum Eintritt des Phasenübergangs. Durch die dreieckigen Symbole werden Meßwerte bei $a^{-1} = 3T_c$ angegeben, die sechseckigen Symbole beziehen sich auf $a^{-1} = 2T_c$. Der schraffierte Bereich gibt die Größenordnung der größten Korrelationslänge am Phasenübergang an. Die eingetragene Kurve ist der Referenz [8] entnommen.*



Werte der Gitterkonstanten gut überein.

Wird zur Bestimmung der Übergangstemperatur die Bedingung $\Delta F/T_c = 160$ aus [59] benutzt, so vergrößert sich die Temperatur T_f nur innerhalb des angegebenen statistischen Fehlers.

9.3 Vergleich der Zugänge

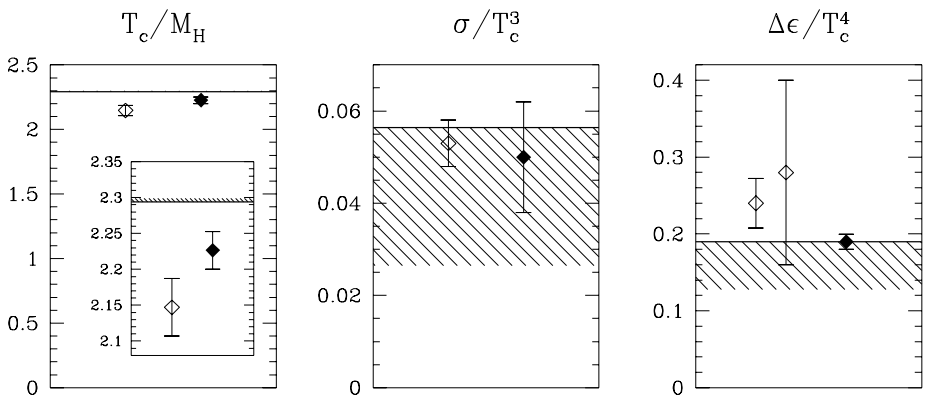
In der Einleitung wurden weitere Ansätze zur Untersuchung der Eigenschaften des Phasenübergangs diskutiert. An dieser Stelle sollen die Ergebnisse der perturbativen Untersuchung in [13] und der Simulationen dreidimensionaler effektiver Theorien in [26] mit den Resultaten dieser Untersuchung verglichen werden. Dabei ist anzumerken, daß die numerische Untersuchung in vier Dimensionen keine prinzipielle Näherung enthält, und daß die Fehler mit größerem Rechenaufwand beliebig verkleinert werden können. Die Ergebnisse sind somit geeignet systematische Fehler der anderen Untersuchungsmethoden aufzuzeigen.

Die Ergebnisse aus [26] wurden in [71] zu einer Higgsmasse $M_H = 34$ GeV und einer Eichkopplung $g^2 = 0.585$ extrapoliert. Dabei wird keine Abschätzung des Fehlers der Extrapolation angegeben, wie der Autor deutlich betont. Die Resultate für das Verhältnis T_c/M_H, die Oberflächenspannung und die latente Wärme sind in der Abbildung 9.3 wiedergegeben. Bei der Eintragung der Fehler der Ergebnisse aus der dreidimensionalen Theorie wurde das Problem der verschiedenen Definitionen der renormierten Eichkopplung ignoriert, die Verschiebung der schwarzen Werte bei Variation der Eichkopplung um ± 0.015 ist in keinem Fall größer als die eingetragenen Fehlerbalken.

Die Größe T_c/M_H bietet die beste Vergleichsmöglichkeit. Hier wird mit allen Zugängen eine hohe Präzision erreicht, beide Simulationsergebnisse sind zum Kontinuumslimes extrapoliert. Die Abweichung von mehr als drei Standardabweichungen zwischen dem perturbativen Wert und dem Ergebnis der vierdimensionalen Simulation ist bereits im Abschnitt 5.3 diskutiert worden. Im Rahmen der eingetragen Fehler stimmen die Simulationsergebnisse in drei und in vier Dimensionen gut miteinander überein. Wenn bei der Extrapolation des schwarzen Punktes zu dem oben angegeben g^2 und M_H keine deutliche Vergrößerung des Fehlers eintritt, so ist auch dieser Wert deutlich kleiner als das perturbative Ergebnis (≥ 2 Standardabweichungen).

Aufgrund der großen eingetragenen Unsicherheiten können aus dem Vergleich der Oberflächenspannung und der latenten Wärme keine signifikanten Abweichungen zwischen den Zugängen aufgezeigt werden. Ein Vergleich der Vakuumerwartungswerte des Skalarfeldes auf diesem Niveau er-

Abbildung 9.3: *Vergleich der Ergebnisse für das SU(2)-Higgs-Modell bei $M_H = 34$ GeV und $g^2 = 0.585$. Die weißen Symbole stehen für die Resultate der Simulationen in 4 Dimensionen und die schwarzen Symbole sind aus den Simulationsergebnissen der dreidimensionalen effektiven Theorie bestimmt, die Werte sind [71] entnommen. Die durchgezogene Linie gibt das perturbative Ergebnis der Ordnung $\mathcal{O}(g^4)$ und der schraffierte Bereich die Abweichung der Ordnung $\mathcal{O}(g^3)$ aus [13] an. Die beiden weißen Symbole der latente Wärme stehen für $a^{-1} = 2T_c$ (links) und $4T_c$ (rechts).*



scheint aufgrund verschiedener Definitionen in den unterschiedlichen Zugängen wenig sinnvoll.

Ein Vergleich der vierdimensionalen Simulationsergebnisse der **l**- und der **h**-Meßreihe mit perturbativen Resultaten ist in [13] zu finden. Die Daten der **l**- und der **h**-Reihe haben nicht die gleiche Präzision wie die obige Untersuchung, so daß keine klaren Diskrepanzen zu erkennen sind.

Der Vergleich der verschiedenen Methoden hat einen Hinweis auf Diskrepanzen zwischen den Simulationsdaten und den perturbativen Resultaten ergeben. Eine genauere Messung der kritischen Temperatur erscheint zur weiteren Klärung wünschenswert und ist unter Verwendung von 64-Bit-Arithmetik in dem in dieser Arbeit vorgestellten Zugang auch erreichbar, vgl. Abschnitt 5.3. Es ist aber zu betonen, daß die relative Abweichung des perturbativen Ergebnisses von dem Resultat in Gl. (5.9) mit 7% recht gering ist.

9.4 Sphaleronenergie

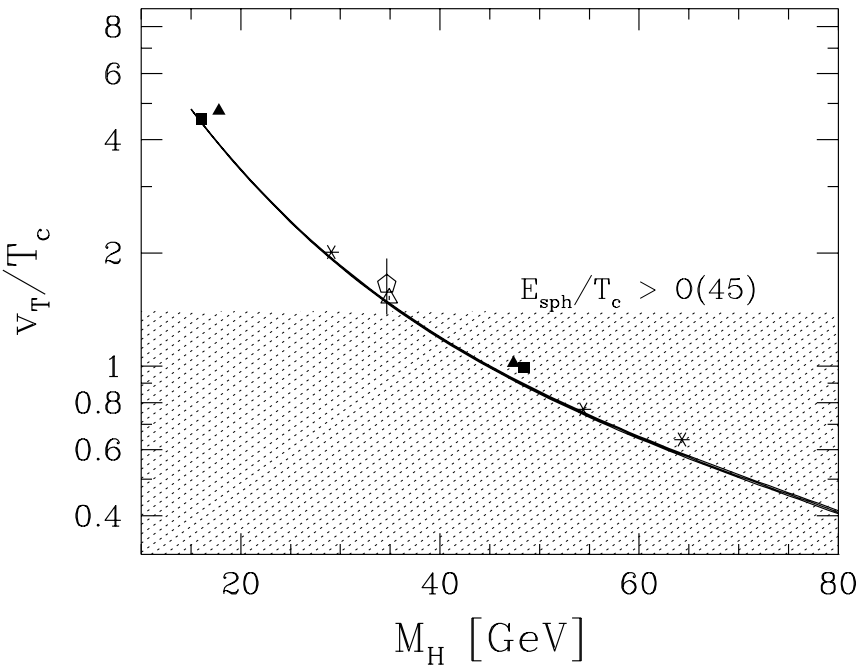
Abschließend soll noch einmal auf die Möglichkeit der Erzeugung einer Baryonenasymmetrie am elektroschwachen Phasenübergang eingegangen werden. Hierzu müssen, wie in der Einleitung geschrieben, die Sphaleronübergänge hinreichend stark unterdrückt sein. Aus der Bedingung (1.2) ergibt sich die Bedingung

$$\frac{v}{T} \geq 1.4\,, \tag{9.1}$$

wenn $B = 2$ und $g^2 = 0.6$ benutzt wird. Das Verhältnis v/T ist bereits im Abschnitt 8.2 ausführlich diskutiert worden.

An dieser Stelle sollen die Ergebnisse der **m**-Reihe in die bisherigen Untersuchungen eingeordnet werden. Dazu werden in der Abbildung 9.4 die v/T_c-Werte verschiedener Untersuchungsmethoden gegen die Higgsbosonmasse aufgetragen. Wir haben die Abbildung [29] entnommen und die Werte der **m**-Reihe hinzugefügt. Das weiße Dreieck gibt den Wert bei $a^{-1} = 2T_c$ und das weiße Fünfeck den

Abbildung 9.4: *Das Verhältnis $v(T_c)/T_c$ als Funktion der Masse M_H. Diese Abbildung ist [29] entnommen und etwas modifiziert worden. Die ausgefüllten Punkte geben die Resultate der* **l***- und* **h***-Meßreihe an. Die Ergebnisse der Simulationen in drei Dimensionen werden durch die Sterne dargestellt und die Kurve ist aus störungstheoretischen Rechnungen entstanden. Durch die weißen Symbole werden die neu hinzugekommenen Werte der* **m***-Reihe dargestellt. Für v/T_c-Werte im schraffierten Bereich wird die Bedingung (1.2) verletzt, und eine am Phasenübergang erzeugte Baryonenasymmetrie wird wieder ausgewaschen.*



bei $a^{-1} = 4T_c$ an. Hierbei handelt es sich nur um einen qualitativen Vergleich, da in den dargestellten Methoden unterschiedliche Definitionen für den Vakuumserwartungswert benutzt wurden. Aus diesem Vergleich ergibt sich aber ein geschlossenes Gesamtbild für das Verhalten der Sphaleronenergie als Funktion der Temperatur.

Die vorstehende Bedingung (9.1) für die Erhaltung einer erzeugten Baryonenasymmetrie wird durch den schraffierten Bereich angegeben. Danach ergibt sich für Higgsmassen $M_H > 40$ GeV in der Higgsphase eine Auswaschung einer während des Phasenübergangs erzeugten Baryonenzahl. Dieser M_H-Wert ist deutlich kleiner als die experimentelle Schranke an die Higgsmasse von 65.2 GeV.

Das Ergebnis des Abschnitts 8.2 läßt keine deutliche Änderung des hier gezeichneten Bildes durch die Unterkühlung bis zum Eintritt des Phasenübergangs erwarten. Weiterhin ist auch durch den Einfluß der Fermionen mit keiner deutlichen Änderung zu rechen. In [26] werden im Rahmen einer Untersuchung im SU(2)-Higgs-Modell in drei Dimensionen Resultate für das SU(2)-Higgs-Modell und das SU(2)-Higgs-Modell mit Fermionen in vier Dimensionen bei Higgsmassen $M_H \approx 54$ GeV und 64 GeV angegeben. Durch den Einfluß der Fermionen ergibt sich eine deutliche Verschiebung der kritischen Temperatur, das Verhältnis v/T_c wird aber nur wenig verändert ($< 3\%$). Insgesamt erscheint die elektroschwache Baryogenese im minimalen Standardmodell als sehr unwahrscheinlich.

Danksagung

Zuerst möchte ich mich bei Herrn Dr. István Montvay für seine Betreuung und Anleitung bedanken. Ich habe viel von seinen Vorschlägen, seiner Vorgehensweise und auch aus seiner Art, Programme zu schreiben, gelernt. Ohne seinen Einsatz wäre diese Arbeit nicht entstanden.

Ganz besonders möchte ich mich auch bei Karl Jansen für seine nicht nur fachliche Unterstützung und so manche Aufmunterung bedanken. Wir haben oft zusammen diskutiert, und ich habe viele wichtige Anregungen von ihm erhalten.

Bei Ferenc Csikor, Zoltán Fodor, Andreas Jaster und Jochen Heitger möchte ich mich für die gute Zusammenarbeit in der Kollaboration bedanken.

Während meiner Doktorandenzeit habe ich von vielen Diskussionen und Anregungen in der DESY-Theoriegruppe profitiert. Besonders möchte ich mich bei Ralf Altmeyer, Prof. W. Buchmüller, Arthur Hebecker, Janne Ignatius, Sven-Olaf Moch, Owe Philipsen und Michael Plümacher bedanken.

Bei meiner Verlobten Sandra Pott und bei meinen Eltern und Geschwistern möchte ich mich für die vielfältige Unterstützung in den letzten Jahren während der Ausarbeitung des Themas bedanken.

Beim DESY-IfH in Zeuthen bedanke ich mich für die zur Verfügung gestellte Rechenzeit auf den Quadrics-Computern, beim HLRZ in Jülich für die Rechenzeit auf der CRAY Y-MP und beim Direktorium des DESY für die finanzielle Unterstützung.

Anhang A

Tabellen

Tabelle A.1: *Fluß der nackten Kopplungen β und λ entlang der Kurven konstanter Physik. Es werden die Ergebnisse für die drei Meßreihen* **l**, **m** *und* **h** *angegeben. Der Wert $-\log(2aT_c)$ unterscheidet sich von τ nur durch eine Konstante und kann somit in der numerischen Integration der Gleichungen (4.4) und (4.5) anstelle von τ verwendet werden. In der Spalte κ wird der benutzte Wert zur Umrechnung zwischen λ und λ_0 angegeben.*

Reihe	a^{-1}	$-\log(2aT_c)$	κ	λ_0	g^2	λ	β
l	$2T_c$	0.000	0.1283	$1.519 \cdot 10^{-3}$	0.500	$1.00 \cdot 10^{-4}$	8.00
	$3T_c$	0.405		$1.678 \cdot 10^{-3}$	0.491	$1.11 \cdot 10^{-4}$	8.15
	$4T_c$	0.693		$1.787 \cdot 10^{-3}$	0.485	$1.18 \cdot 10^{-4}$	8.25
	$5T_c$	0.916		$1.869 \cdot 10^{-3}$	0.480	$1.23 \cdot 10^{-4}$	8.33
m	$2T_c$	0.000	0.12865	$4.532 \cdot 10^{-3}$	0.500	$3.00 \cdot 10^{-4}$	8.00
	$3T_c$	0.405		$4.661 \cdot 10^{-3}$	0.491	$3.09 \cdot 10^{-4}$	8.15
	$4T_c$	0.693		$4.750 \cdot 10^{-3}$	0.485	$3.14 \cdot 10^{-4}$	8.25
	$5T_c$	0.916		$4.816 \cdot 10^{-3}$	0.480	$3.19 \cdot 10^{-4}$	8.33
h	$2T_c$	0.000	0.12887	$7.527 \cdot 10^{-3}$	0.500	$5.00 \cdot 10^{-4}$	8.00
	$3T_c$	0.405		$7.631 \cdot 10^{-3}$	0.491	$5.07 \cdot 10^{-4}$	8.15
	$4T_c$	0.693		$7.702 \cdot 10^{-3}$	0.485	$5.12 \cdot 10^{-4}$	8.25
	$5T_c$	0.916		$7.755 \cdot 10^{-3}$	0.480	$5.15 \cdot 10^{-4}$	8.33

Tabelle A.2: *Parameter und Sweepzahl zur Bestimmung der Massen bei $T = 0$ und der renormierten Kopplungen.*

Index	Gitter Ω	β	κ	λ	Sweeps
m2[6]	$6^3 \times 32$	8.00	0.12865	0.0003	384000
m2[8]	$8^3 \times 32$	8.00	0.12865	0.0003	288000
m2[12/65]	$12^3 \times 32$	8.00	0.12865	0.0003	320000
m2[16]	$16^3 \times 32$	8.00	0.12865	0.0003	192000
m2[24]	$24^3 \times 64$	8.00	0.12865	0.0003	38000
m2[12/70]	$12^3 \times 32$	8.00	0.12870	0.0003	448000
m3[24/35]	$24^3 \times 32$	8.15	0.128355	0.00031	32000
m3[24/40]	$24^3 \times 32$	8.15	0.128405	0.00031	11200
m4[24/35]	$24^3 \times 64$	8.25	0.128235	0.000315	168000
m4[24/85]	$24^3 \times 64$	8.25	0.128285	0.000315	14400
m5[32/17]	$32^3 \times 64$	8.33	0.128170	0.000319	37740
m5[32/21]	$32^3 \times 64$	8.33	0.128210	0.000319	15300

Tabelle A.3: *Renormierte Massen in der* **m***-Meßreihe. Der Index bezieht sich auf die Tabelle A.2, wo die Gittergrößen, die nackten Parameter und die Sweepzahlen angegeben werden.*

Index	M_H	M_W	R_{HW}	M_H (GeV)
m2[6]	0.2336(13)	0.5587(13)	0.4181(33)	33.5
m2[8]	0.2480(12)	0.5573(28)	0.4450(44)	35.7
m2[12/65]	0.2451(14)	0.5619(21)	0.4362(41)	35.0
m2[16]	0.2436(21)	0.5644(21)	0.4316(53)	34.6
m2[24]	0.2471(39)	0.5665(17)	0.436(8)	35.0
m2[12/70]	0.2585(9)	0.5888(13)	0.4390(25)	35.2
m3[24/35]	0.1587(14)	0.3712(31)	0.428(7)	34.2
m3[24/40]	0.1796(40)	0.414(8)	0.433(18)	34.7
m4[24/35]	0.1198(15)	0.2765(23)	0.433(9)	34.8
m4[24/85]	0.1428(25)	0.3427(42)	0.417(12)	33.4
m5[32/17]	0.0907(15)	0.221(5)	0.411(16)	32.9
m5[32/21]	0.1205(20)	0.284(5)	0.425(15)	34.0

Tabelle A.4: *Resultate der Fitparameter und der renormierten Kopplungen in den Punkten der* **m***-Meßreihe. Für die Punkte mit den Indizes* m2[...] *sind in den Yukawafits alle* $V(r)$ *ausgewertet worden, ansonsten wurden nur* $V(r)$*-Werte mit* $r \geq 2$ *berücksichtigt, wie im Abschnitt 5.2 erläutert*

Index	M	D	C	$g_R^2 := \frac{16}{3}\pi A$	$g_R^2(M^{-1})$
m2[8]	0.538(4)	0.0336(7)	0.08673(5)	0.5722(19)	0.571(3)
m2[12/65]	0.5498(14)	0.0356(5)	0.086177(6)	0.5734(5)	0.5764(16)
m2[16]	0.5551(13)	0.0366(6)	0.086117(3)	0.5741(5)	0.5788(16)
m2[24]	0.555(4)	0.0361(18)	0.086115(6)	0.5747(15)	0.578(3)
m2[12/70]	0.5815(14)	0.0360(5)	0.085050(5)	0.5731(5)	0.5764(13)
m3[24/35]	0.378(7)	0.026(4)	0.091716(12)	0.615(18)	0.591(7)
m3[24/40]	0.413(13)	0.031(9)	0.090100(15)	0.602(38)	0.583(10)
m4[24/35]	0.269(5)	0.0293(24)	0.094267(19)	0.592(10)	0.584(6)
m4[24/85]	0.328(7)	0.030(4)	0.092065(21)	0.590(17)	0.580(8)
m5[32/17]	0.2135(35)	0.0275(22)	0.095416(20)	0.593(8)	0.586(8)
m5[32/21]	0.270(5)	0.028(3)	0.093295(22)	0.590(12)	0.581(8)

Tabelle A.5: *Verhältnis der kritischen Temperatur zu den Massen* M_H *und* M_W*. Für den Kontinuumslimes werden Gitterartefakte der Ordnung* $\mathcal{O}(a^2)$ *betrachtet. Die Meßunsicherheit des kritischen Hoppingparameters ist jeweils berücksichtigt.*

a	$[2T_c]^{-1}$	$[3T_c]^{-1}$	$[4T_c]^{-1}$	$[5T_c]^{-1}$	$a \to 0$
T_c/M_H	2.026(11)	2.100(33)	2.087(48)	2.21(10)	2.147(40)
T_c/M_W	0.8844(30)	0.898(13)	0.904(19)	0.905(40)	0.910(16)

Tabelle A.6: *Meßdaten der Größen* $L_\varphi^{(1)}$*,* $L_\varphi^{(2)}$ *und* ΔL_φ *zur Bestimmung der Oberflächenspannung. Es gilt* $\Omega = 2 \times 24^2 \times 200$*,* $\beta = 8.0$ *und* $\lambda = 0.0003$*.*

κ_1	κ_2	Sweeps	$L_\varphi^{(1)}$	$L_\varphi^{(2)}$	ΔL_φ
0.12845	0.12885	10000	1.0607(30)	7.9042(91)	6.8435(83)
0.12849	0.12881	10000	1.0614(32)	7.007(10)	5.9461(92)
0.12853	0.12877	10000	1.0587(41)	6.058(12)	4.999(10)
0.12855	0.12875	12000	1.0684(38)	5.581(12)	4.513(11)
0.12857	0.12873	14000	1.0678(42)	5.035(12)	3.967(11)

Tabelle A.7: *Fitkoeffizienten in den beiden Gitterhälften entsprechend Ansatz (6.26). Für $i = 2$ gibt die erste Zahl in der Klammer den statistischen Fehler an, die zweite Zahl den Einfluß der Unsicherheit von κ_c. Bei $i = 1$ ist nur der statistische Fehler angegeben, da der Einfluß von κ_c auf diese Koeffizienten sehr gering ist.*

	a_i	b_i	c_i	χ^2
$i = 1$	$0.27(29) \cdot 10^{-5}$	1.03(4)	−80(160)	1.88
$i = 2$	$3.78(61{+}7) \cdot 10^{-5}$	3.99(11+1)	21237(410+16)	1.50

Tabelle A.8: *Simulationsparameter der Messungen im metastabilen Bereich des Phasenübergangs. In den Simulationen mit den Indizes m4[a] und m4[b] wurde der verbesserte Auffrischungsalgorithmus aus [37] benutzt.*

Index	Gitter	β	κ	λ	Sweeps	Startkonfig.
m2[a]	2×32×32×96	8.0	0.12866	0.0003	160000	Higgsphase
m2[b]	2×32×32×96	8.0	0.12866	0.0003	40000	sym. Phase
m2'[a]	2×32×32×96	8.0	0.12865	0.0003	192000	Higgsphase
m2'[b]	2×32×32×96	8.0	0.12865	0.0003	192000	sym. Phase
m4[a]	4×64×64×192	8.25	0.128235	0.000315	24500	Higgsphase
m4[b]	4×64×64×192	8.25	0.128235	0.000315	40000	sym. Phase

Tabelle A.9: *Globale Erwartungswerte im metastabilen Bereich in der Umgebung des Phasenübergangs. Der Index bezieht sich auf Tabelle A.8 und gibt den Lauf an, in dem die Daten gewonnen worden sind. In der Spalte „Fit“ wird die Ordnung der Taylorprojektion zu dem jeweiligen κ-Wert angegeben, vgl. Abschnitt 3.5.*

Index	κ	Fit	P_{pl}	$L_{\varphi,x\mu}$	Q_x
m2[a]	0.1286572	2. Ordnung	0.094693(6)	3.146(11)	28.58(12)
	0.1286565	2. Ordnung	0.094712(8)	3.112(13)	28.20(14)
	0.1286558	2. Ordnung	0.094732(9)	3.078(15)	27.81(17)
m2[b]	0.1286572	2. Ordnung	0.096021(1)	0.9205(4)	8.077(3)
	0.1286565	2. Ordnung	0.096021(1)	0.9199(4)	8.074(3)
	0.1286558	2. Ordnung	0.096021(1)	0.9194(4)	8.070(3)
m4[a]	0.128240	2. Ordnung	0.092860(22)	1.441(38)	11.70(28)
	0.128235	—	0.0929636(11)	1.2440(23)	10.227(17)
	0.128230	2. Ordnung	0.093089(18)	1.008(29)	8.57(21)
m4[b]	0.128240	2. Ordnung	0.093306(1)	0.5996(11)	5.989(7)
	0.128235	—	0.093309(1)	0.5939(3)	5.955(2)
	0.128230	2. Ordnung	0.093310(1)	0.5907(3)	5.936(2)

Tabelle A.10: *Erwartungswerte des Operators ρ_x^2 im metastabilen Bereich in der Umgebung des Phasenübergangs. Der Index bezieht sich auf Tabelle A.8 und gibt den Lauf an, in dem die Daten gewonnen worden sind.*

κ	Fit	Index	$\rho^2_{x,\mathrm{Higgs}}$	Index	$\rho^2_{x,\mathrm{sym}}$
0.12866	—	m2[a]	5.348(7)	m2[b]	2.9436(5)
0.12865	—	m2'[a]	4.755(12)	m2'[b]	2.9353(3)
0.128240	2. Ordnung	m4[a]	3.470(39)	m4[b]	2.6104(11)
0.128235	—	m4[a]	3.2684(24)	m4[b]	2.6045(3)
0.128230	2. Ordnung	m4[a]	3.027(30)	m4[b]	2.6013(3)

Tabelle A.11: *Erwartungswerte zur Bestimmung von $\delta(T)$. Im ersten Teil der Tabelle gilt $T_c = \frac{1}{2a}$, im zweiten Teil $T_c = \frac{1}{4a}$. Für die nackten Parameter gilt $\beta = 8.0$, $\lambda = 0.0003$ bzw. $\beta = 8.15$, $\lambda = 0.000315$. Direkt am Phasenübergang gibt es für jede metastabile Phase eine separate Messung. In der Klammer wird der statistische Fehler angegeben, und mit dem letzten Eintrag wird die Änderung der Meßwerte angegeben, wenn κ_c in seinem Fehlerbereich variiert wird. Dabei wurde $\kappa_c = 0.1286565(\pm 7)$ bzw. $\kappa_c = 0.128235(\pm 5)$ benutzt. Die Meßpunkte am Phasenübergang wurden in der Tabelle A.9 bereits angegeben. Auch hier ist in der Spalte „Fit“ die Ordnung der Taylorprojektion angegeben.*

Gitter Ω	Fit	P_{pl}	$L_{\varphi,x\mu}$	Q_x
$32\times32^2\times32$	1. Ordnung	0.0919035(8)∓61	9.1869(9)±130	132.124(21)±300
$8\times32^2\times32$	1. Ordnung	0.0919075(7)∓61	9.1757(8)±130	131.898(18)±300
$6\times32^2\times96$	1. Ordnung	0.0919204(9)∓61	9.1298(11)±130	130.888(25)±300
$5\times32^2\times96$	1. Ordnung	0.0919557(10)∓61	9.0521(11)±130	129.162(24)±300
$4\times32^2\times96$	1. Ordnung	0.0920461(5)∓63	8.8239(5)±130	124.103(10)±300
$3\times32^2\times96$	1. Ordnung	0.0923641(5)∓70	8.0267(6)±140	107.063(13)±300
$2\times32^2\times96$	2. Ordnung	0.094712(7)∓19	3.112(13)±34	28.20(15)±39
$2\times32^2\times96$	2. Ordnung	0.0960210(6)∓3	0.9199(4)±5	8.074(3)±4
$48\times48^2\times48$	1. Ordnung	0.0923167(3)∓470	2.5434(5)±950	21.199(5)±930
$12\times64^2\times64$	1. Ordnung	0.0923226(4)∓490	2.5292(6)±980	21.066(6)±960
$8\times64^2\times64$	1. Ordnung	0.0923604(7)∓530	2.4571(10)±1000	20.380(10)±1000
$6\times64^2\times192$	1. Ordnung	0.0924439(6)∓500	2.2809(9)±1000	18.734(8)±940
$5\times64^2\times192$	1. Ordnung	0.0925683(6)∓590	2.0276(10)±1200	16.467(9)±1000
$4\times64^2\times192$	2. Ordnung	$0.0929636(11)^{-1000}_{+1300}$	$1.2440(23)^{+2000}_{-2400}$	$10.227(17)^{+1500}_{-1700}$
$4\times64^2\times192$	2. Ordnung	$0.0933086(3)^{-28}_{+13}$	$0.5939(3)^{+57}_{-32}$	$5.955(2)^{+34}_{-19}$
$3\times64^2\times192$	2. Ordnung	$0.0932657(4)^{-8}_{+3}$	0.64536(7)±110	6.2639(4)±69
$3\times92^2\times192$	2. Ordnung	0.0932655(6)∓10	0.64522(14)±100	6.2630(9)±63
$2\times64^2\times192$	2. Ordnung	$0.0930844(6)^{-7}_{+1}$	0.83147(6)±75	7.4490(4)±52

Tabelle A.12: *Erwartungswerte für ρ_x^2 bei verschiedenen Temperaturen. Die Ordnung der Taylorprojektion und die räumliche Gitterausdehnung können der Tabelle A.11 entnommen werden. Bei $T_c \approx 1/4$ gilt $\beta = 8.15$, $\lambda = 0.000315$ und bei $T_c \approx 1/2$ gilt $\beta = 8$ und $\lambda = 0.0003$.*

Phase	L_t	$T_c \approx 1/4$			$T_c \approx 1/2$
		$\kappa = 0.128235$	$\kappa = 0.128230$	$\kappa = 0.128240$	$\kappa = 0.12826565$
sym.	2	2.84713(6)	2.84632(7)	2.84795(7)	—
sym.	3	2.65707(7)	2.65591(9)	2.65825(8)	—
sym.	4	2.6045(3)	2.6013(3)	2.6104(11)	—
Higgs	3	—	—	—	10.1918(6)
Higgs	4	3.2684(24)	3.027(30)	3.470(39)	11.0015(5)
Higgs	5	4.0678(10)	3.950(4)	4.186(4)	11.2332(11)
Higgs	6	4.3260(9)	4.223(4)	4.429(4)	11.3120(11)
Higgs	8	4.5056(11)	4.399(4)	4.612(3)	11.3586(8)
Higgs	12	4.5791(6)	4.480(3)	4.679(3)	—
Higgs	32	—	—	—	11.3701(9)
Higgs	48	4.5936(5)	4.497(3)	4.690(3)	—

Tabelle A.13: *Überblick über die wichtigsten Eigenschaften des elektroschwachen Phasenübergangs im SU(2)-Higgs-Modell. Die angegebenen Resultate sind dieser Arbeit und [19, 20, 22] entnommen worden.*
Zur Bestimmung der kritischen Temperatur wurde in allen Meßreihen die Größe T_c/M_W entsprechend Abb. 5.4 zu kleinen a-Werten extrapoliert. Die angegebenen Werte sind mit $M_W = 80$ GeV bestimmt worden. Der Fehler der **m***-Reihe enthält die Unsicherheit des kritischen Hoppingparameters, in den anderen Reihen ist der Einfluß des Hoppingparameters auf die Resultate nicht bestimmt worden. Für die latente Wärme ist das Ergebnis aus Gl. (7.4) und für die Oberflächenspannung ist das Resultat der Methode mit dem kleinsten Fehler angegeben.*
Im unteren Teil der Tabelle wird die Unterkühlung vor Eintritt des Phasenübergangs unter der Annahme einer dünnen Blasenwand angegeben. T_f bezeichnet die Temperatur des Phasenübergangs und $R_{c,L}$ den Laplace-Radius, wie im Abschnitt 6.1 erläutert. In der **l***-Reihe ist diese Annahme nicht glaubhaft, siehe Abschnitt 9.2, die entsprechenden Werte sind* kursiv *gedruckt.*

Meßgröße	a	**l**-Reihe	**m**-Reihe	**h**-Reihe
$M_H(T=0)$		17 GeV	34 GeV	48 GeV
$g_R^2(M^{-1})$		≈ 0.56	≈ 0.585	≈ 0.58
T_c	$\lim_{a\to 0}$	36.6 $\pm$0.7 GeV	72.8 $\pm$1.3 GeV	95.4 $\pm$2.3 GeV
$\frac{\Delta\epsilon}{T_c^4}$	$[2T_c]^{-1}$	1.81(29)	0.240(30+4)	0.132(17)
	$[3T_c]^{-1}$	1.57(13)	—	0.122(9)
	$[4T_c]^{-1}$	—	0.28(3+9)	—
$\frac{\sigma}{T_c^3}$	$[2T_c]^{-1}$	0.83(4)	0.053(5)	0.008(2)
	$[3T_c]^{-1}$	0.77(10)	—	—
Q_F	$[2T_c]^{-1}$	1.71(34)	0.21(4)	0.022(9)
	$[3T_c]^{-1}$	1.76(39)	—	—
$\frac{T_c - T_f}{T_c}$	$[2T_c]^{-1}$	*0.166(33)*	0.0202(39)	0.0022(9)
	$[3T_c]^{-1}$	*0.171(39)*	—	—
$T_c\, R_{c,L}(T_f)$	$[2T_c]^{-1}$	*5.52(13)*	21.9 $\pm$1.0	56. $\pm$9.
	$[3T_c]^{-1}$	*5.73(41)*	—	—

Literaturverzeichnis

[1] D.A. Kirzhnitz, A.D. Linde, Physics Letters **B42** (1972) 471.

[2] V.A. Kuzmin, V.A. Rubakov, M.E. Shaposhnikov, Phys. Lett. **B155** (1985) 36.

[3] A.D. Sakharov, JETP Letters **5** (1967) 24.

[4] S. Adler, Phys. Rev. **177** (1969) 2426; J.S. Bell, R. Jackiw, Nuovo Cim. **60A** (1969) 47.

[5] G. 't Hooft, Phys. Rev. Lett. **37** (1976) 8; G. 't Hooft, Phys. Rev. **D14** (1976) 3432.

[6] F.R. Klinkhamer, N.S. Manton, Phys. Rev. **D30** (1984) 2212.

[7] M.E. Shaposhnikov, Nucl. Phys. **B287** (1987) 757.

[8] D. Bödeker, W. Buchmüller, Z. Fodor, T. Helbig, Nucl. Phys. **B423** (1994) 171.

[9] M.E. Carrington, Phys. Rev. **D45** (1992) 2933.

[10] P. Arnold, O. Espinosa, Phys. Rev. **D47** (1993) 3547; Erratum: ibid. **D50** (1994) 6662.

[11] W.Buchmüller, Z. Fodor, T. Helbig, D. Waliser, Ann. Phys. (NY) **234** (1994) 260.

[12] Z. Fodor, A. Hebecker, Nucl. Phys. **B432** (1994) 127.

[13] W. Buchmüller, Z. Fodor, A. Hebecker, Nucl. Phys. **B447** (1995) 317.

[14] U. Kerres, G. Mack, G. Palma, DESY-Preprint, DESY 94-226, `hep-lat/9505008`, erscheint in Nucl. Phys. **B**; U. Kerres, G. Mack, G. Palma, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **42** (1995) 584.

[15] A. Jakovác, Phys. Rev. **D53** (1996) 4538.

[16] K. Farakos, K. Kajantie, K. Rummukainen, M. Shaposnikov, Nucl. Phys. **B425** (1994) 43; K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen, M. Shaposhnikov, Nucl. Phys. **B458** (1996) 90.

[17] B. Bunk, E.M. Ilgenfritz, J. Kripfganz, A. Schiller, Nucl. Phys. **B403** (1993) 453.

[18] Z. Fodor, J. Hein, K. Jansen, A. Jaster, I. Montvay, F. Csikor, Phys. Lett. **B334** (1994) 405.

[19] Z. Fodor, J. Hein, K. Jansen, A. Jaster, I. Montvay, Nuclear Physics **B439** (1995) 147.

[20] F. Csikor, Z. Fodor, J. Hein, J. Heitger, Phys. Lett. **B357** (1995) 156.

[21] F. Csikor, Z. Fodor, J. Hein, A. Jaster, I. Montvay, DESY-Preprint, DESY 95-206, erscheint in Nucl. Phys. **B**.

[22] J. Hein, J. Heitger, DESY-Preprint, DESY 96-066, `hep-lat/9605009`.

[23] K. Kajantie, K. Rummukainen, M. Shaposnikov, Nucl. Phys. **B407** (1993) 356; K. Farakos, K. Kajantie, K. Rummukainen, M. Shaposnikov, Phys. Lett. **B336** (1994) 494; Nucl. Phys. **B442** (1995) 317.

[24] F. Karsch, T. Neuhaus, A. Patkós, Nucl. Phys. **B441** (1995) 629.

[25] E.M. Ilgenfritz, J. Kripfganz, H. Perlt, A. Schiller, Phys. Lett. **B356** (1995) 561.

[26] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen, M. Shaposnikov, CERN-Preprint, CERN-TH-95-263, `hep-lat/9510020`.

[27] O. Philipsen, M. Teper, H. Wittig, DESY-Preprint, DESY 96-017, `hep-lat/9602006`.

[28] F. Karsch, T. Neuhaus, A. Patkós, J. Rank, BI-TP 96/10, `hep-lat/9603004`.

[29] Karl Jansen, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **47** (1996) 196.

[30] V.A. Rubakov, M.E. Shaposhnikov, erscheint in Usp. Fiz. Nauk, **166**, No. 5, (1996), `hep-ph/9603208`.

[31] J.F. Grivaz, Proc. International EPS Conference on High Energy Physics, Brüssel 27. Juli - 2. August 1995.

[32] K.G. Wilson, Phys. Rev. **D10** (1974) 2445

[33] I. Montvay, G. Münster (1994), „Quantum Fields on a Lattice“ (Cambridge University Press, Cambridge)

[34] M. Lüscher, Comput. Phys. Commun. **79** (1994) 100.

[35] G. Marsaglia, A. Zaman, Ann. Appl. Prob. **1** (1991) 249.

[36] N. Attig et. al. (1994), „Einführung in die Benutzung der CRAY-Rechner“, KFA-ZAM-BHB-0093, 8. Auflage.

[37] B. Bunk, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **42** (1995) 566.

[38] Z. Fodor, K. Jansen, Phys. Lett. **B331** (1994) 119.

[39] F. Csikor, Z. Fodor, J. Hein, K. Jansen, A. Jaster, I. Montvay, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **42** (1995) 569.

[40] K. Fabricius, O. Haan, Phys. Lett. **B143** (1984) 459.

[41] A.D. Kennedy, B.J. Pendleton, Phys. Lett. **B156** (1985) 393.

[42] A.D. Sokal, „Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundation and New Algorithms“ in: Cours du Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, Lausanne (1989).

[43] C. Michael, Phys. Rev. **D 49** (1994) 2616.

[44] C. Michael, A. McKerrell, Phys. Rev. **D 51** (1995) 3745.

[45] A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635; A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1195.

[46] I. Montvay, Nucl. Phys. **B239** (1987) 479.

[47] K. Binder et. al., in „Dynamics of First Order Phase Transitions“, Hrsg. H.J. Herrmann, W. Janke, F. Karsch, (World Scientific, Singapore, 1992), Seite 253.

[48] C. Borgs, W. Janke, Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1738; W. Janke, in „Computer Simulations in Condensed Matter Physics VII“, Hrsg. D.P. Landau, K.K. Mon, H.B. Schüttler (Springer Verlag, Heidelberg, Berlin, 1994), `hep-lat/9410021`.

[49] Andreas Jaster, Doktorarbeit, (1995), Universität Hamburg.

[50] C. Borgs, Nucl. Phys. **B384** (992) 605.

[51] S. Kappler, C. Borgs, in „Dynamics of First Order Phase Transitions“, Hrsg. H.J. Herrmann, W. Janke, F. Karsch, (World Scientific, Singapore, 1992), Seite 327.

[52] I. Montvay, P. Weisz, Nucl. Phys. **B290** (1987) 327.

[53] M. Lüscher, Com. Math. Phys. **104** (1986) 177.

[54] W. Langguth, I. Montvay, P. Weisz, Nucl. Phys. **B277** (1986) 11.

[55] B. Efron, SIAM Review **21** (1979) 460.

[56] R. Sommer, Nucl. Phys. **B411** (1994) 839.

[57] W. Buchmüller, O. Philpsen, Nucl. Phys. **B443** (1995) 47.

[58] J.S. Langer, Ann. Phys. **54** (1969) 258.

[59] K. Enqvist, J. Ignatius, K. Kajantie, K. Rummukainen, Phys. Rev. **D 45** (1992) 3415.

[60] J. Ignatius, Doctoral Thesis, (1993), University of Helsinki, HU-TFT-IR-93-1

[61] A.D. Linde, Nucl. Phys. **B216** (1983) 421.

[62] L.P. Csernai, J.I. Kapusta, Phys. Rev. **D46** (1992) 1379.

[63] J. Potvin, C. Rebbi, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 3062; S. Huang, J. Potvin, C. Rebbi, S. Sanielevici, Phys. Rev. **D42** (1990) 2864; Erratum: ibid. **D43** (1991) 2056.

[64] G. Münster, Nucl. Phys. **B340** (1990) 559.

[65] K. Binder, Z. Phys. **B43** (1981) 119; Phys. Rev. **A25** (1982) 1699.

[66] B.A. Berg, T. Neuhaus, Phys. Lett. **B267** (1991) 249.

[67] J. Engels, F. Karsch, H. Satz, I. Montvay, Nucl. Phys. **B205** (1982) 545.

[68] A. Hebecker, Doktorarbeit, (1995), Universität Hamburg, `hep-ph/9506418`.

[69] E.W. Kolb, M.S. Turner (1990), „The Early Universe“
(Addison Wessley, Redwood City, California)

[70] K. Huang (1987),„Statistical Mechanics“
(John Wiley & Sons, New York)

[71] M. Laine, Preprint,
HD-THEP-96-08, `hep-lat/9604011`.

Abbildungsverzeichnis

3.1 Architektur eines Quadrics-Computers . . . 11
3.2 Verteilung der Punkte eines Gitters auf einer Parallelmaschine . . . 11
3.3 Vergleich der Autokorrelationsfunktion . . . 14
3.4 Messung des dynamischen kritischen Exponenten . . . 15
3.5 $L_{\varphi,x\mu}$ als Funktion von κ . . . 18

4.1 Histogramm zur Bestimmung des kritischen Punktes und der Oberflächenspannung . . . 21
4.2 Hysteresekurven . . . 23
4.3 z-Scheibenerwartungswerte in 2-Kopplungs-Simulation . . . 23
4.4 z-Scheibenerwartungswerte bei beschränktem Ordnungsparameter . . . 25
4.5 Histogramme mit beschränktem Ordnungsparameter . . . 27
4.6 Kritischer Hoppingparameter als Funktion des räumlichen Volumens . . . 29

5.1 Volumenabhängigkeit der renormierten Massen . . . 32
5.2 Yukawafit an das statische Potential . . . 33
5.3 Volumenabhängigkeit der renormierten Eichkopplung . . . 34
5.4 Kritische Temperatur in Einheiten der Higgsbosonmasse . . . 35
5.5 Korrelationsfunktionen in der Umgebung des Phasenübergangs . . . 38

6.1 Modell für $L_\varphi^{(1)}(v,\kappa_2)$ und $L_\varphi^{(2)}(\kappa_1,v)$ . . . 44
6.2 Laurentfit zur Bestimmung der Oberflächenspannung . . . 46

8.1 Resultat der Messung der Größe $\delta(T) := \frac{1}{3}\epsilon - P$ . . . 54
8.2 Tangenten von $\delta(T)/T^4$ . . . 56
8.3 Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes als Funktion der Temperatur . . . 58

9.1 Kritische Temperatur in GeV . . . 60
9.2 Unterkühlung am Phasenübergang . . . 61
9.3 Vergleich der Ergebnisse für das SU(2)-Higgs-Modell . . . 62
9.4 $v(T_c)/T_c$ als Funktion der Masse M_H . . . 63

Tabellenverzeichnis

4.1 Werte des kritischen Hoppingparameters aus 2-Kopplungs-Methode 26
4.2 Resultate der Simulation mit beschränktem Ordnungsparameter 26
4.3 Extrapolation des kritischen Hoppingparameters 29

5.1 Massen bei $T \approx T_c$ 36

A.1 Fluß der nackten Kopplungen β und λ 65
A.2 Parameter und Sweepzahl zur Bestimmung der Massen und Kopplungen 66
A.3 Renormierte Massen in der **m**-Meßreihe 66
A.4 Resultate der renormierten Kopplungen 67
A.5 Verhältnis der kritischen Temperatur zu den Massen M_H und M_W 67
A.6 Meßdaten zur Bestimmung der Oberflächenspannung 67
A.7 Fitkoeffizienten für die σ-Bestimmung 68
A.8 Simulationsparameter der Messungen im metastabilen Bereich 68
A.9 Erwartungswerte der Operatoren P_{pl}, $L_{\varphi,x\mu}$ und Q_x im metastabilen Bereich 68
A.10 Erwartungswerte des Operators ρ_x^2 im metastabilen Bereich 69
A.11 Erwartungswerte zur Bestimmung von $\delta(T)$ 69
A.12 Erwartungswerte für ρ_x^2 bei verschiedenem T 70
A.13 Eigenschaften des elektroschwachen Phasenübergangs im SU(2)-Higgs-Modell 71