

Diplomarbeit

# Eine Strategie zur nichtstörungstheoretischen Fixierung der schweren Quarkmasse in B-Meson-Systemen

---

Dirk Hesse

Münster, 7. Januar 2008



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2. Quantenfelder auf dem Gitter</b>	<b>5</b>
2.0.1. Natürliche Einheiten . . . . .	5
2.1. Die Dirac-Gleichung . . . . .	5
2.2. Das Pfadintegral . . . . .	6
2.3. Quantenfeldtheorie auf dem Gitter . . . . .	8
<b>3. Heavy Quark Effective Theory (HQET)</b>	<b>11</b>
3.0.1. Definition . . . . .	12
3.1. Renormierbarkeit . . . . .	13
3.2. Abgleichen von HQET und QCD . . . . .	14
3.3. Abgleich in endlichem Volumen . . . . .	16
3.3.1. Schrittweise Skalierung . . . . .	16
3.3.2. Physikalische Observable in der effektiven Theorie . . . . .	17
<b>4. Die Quarkmasse und ihre Bedeutung</b>	<b>19</b>
4.1. Die PCAC-Masse . . . . .	19
4.2. Massenunabhängige Renormierung . . . . .	20
<b>5. Das Schrödingerfunktional</b>	<b>23</b>
5.1. Vorbereitungen . . . . .	23
5.2. Definition . . . . .	24
5.3. Interpretation . . . . .	25
5.4. Quarks . . . . .	28
5.5. Renormierungseigenschaften . . . . .	29
5.6. Die laufende Kopplung . . . . .	30
<b>6. Das Schrödingerfunktional auf dem Gitter</b>	<b>33</b>
6.1. Eichfelder . . . . .	33
6.2. Quarkfelder . . . . .	35
<b>7. Die Bestimmung von <math>M_b</math></b>	<b>37</b>
7.1. Überblick über die Strategie . . . . .	37
7.2. Benötigte Größen . . . . .	38
7.3. $M_b$ in niedrigster Ordnung . . . . .	42

<b>8. Eine neue Strategie zur Fixierung der RGI-Quarkmasse</b>	<b>43</b>
8.1. Die neue Strategie . . . . .	44
8.1.1. Skalierung . . . . .	45
8.1.2. Umrechnung in die RGI-Quarkmasse . . . . .	45
<b>9. Vorüberlegungen und Berechnung der benötigten Größen</b>	<b>47</b>
9.1. Monte-Carlo-Integration . . . . .	47
9.2. Durchgeführte Simulationen . . . . .	48
9.3. Verwendete Analysemethoden . . . . .	48
9.4. Benötigte Größen . . . . .	55
9.4.1. Die Masse $m_Q^P$ . . . . .	55
9.4.2. Die Skalierungsfunktion $\sigma_Q$ . . . . .	56
9.4.3. Kontinuumslimes . . . . .	57
9.4.4. Bestimmung von $\Sigma_Q$ . . . . .	57
<b>10. Die Anwendung der neuen Strategie</b>	<b>61</b>
10.1. $\sigma_Q$ oder $\sigma'_Q$ ? . . . . .	61
10.2. Anschluss ans alte Schema . . . . .	61
10.3. Anwendung der Skalierungsfunktion . . . . .	62
10.4. Berechnung der RGI-Quarkmasse . . . . .	64
10.5. Wiederholung der Rechnung mit einer Iteration . . . . .	65
10.6. Übersicht über die Beiträge der einzelnen Fehlerquellen . . . . .	65
10.7. Wiederholung der Rechnung in Jackknife-Samples . . . . .	66
10.8. Bestimmung von $M_b$ . . . . .	66
10.9. Untersuchung der Gültigkeit der $O(a)$ -Verbesserung . . . . .	66
<b>11. Schlusswort</b>	<b>69</b>
<b>A. <math>1/m_B</math>-Entwicklung</b>	<b>71</b>
<b>B. Dokumentation der C++-Klassen</b>	<b>73</b>
B.1. Measurement . . . . .	73
B.2. Data . . . . .	77
B.2.1. Konstruktoren . . . . .	77
B.2.2. Variablen . . . . .	77
B.2.3. Methoden . . . . .	77
<b>C. Tabellen</b>	<b>79</b>
C.1. Quenched . . . . .	79
C.2. $N_f = 2$ . . . . .	82

# 1. Einleitung

Das Standardmodell der Elementarteilchen, ein Oberbegriff für die Theorien der starken und der elektroschwachen Wechselwirkung, bietet tiefe Einblicke in die Natur unserer Welt. Es liefert Vorhersagen über die Zusammensetzung der Materie über viele Größenordnungen, die Lebensdauer von exotischen Teilchen, das Verhalten von Kernmaterie unter extremsten Bedingungen und vieles mehr. Es hat seit seiner Formulierung in den 70er Jahren des letzten Jahrhunderts eine unüberschaubare Menge zutreffender Vorhersagen geliefert und steht bisher zu keinem der vielzähligen durchgeführten Experimente im Widerspruch.

Dennoch wissen wir, dass das Standardmodell eine unvollständige Sichtweise auf die Natur bietet. Es besitzt 26 freie Parameter, was natürlich die Frage nach deren Herkunft aufwirft und beinhaltet keine Gravitation. Weiter vermag es wichtige Fragestellungen wie zum Beispiel die nach der Entstehung der beobachteten Baryonenasymmetrie und die endlichen Neutrinosmassen nicht beantworten. Ein Schlüssel zum Verständnis einiger dieser Phänomene ist die Verletzung der CP-Symmetrie, die man lange für exakt hielt.

Ein Aspekt hierbei ist die Untersuchung der CP-Verletzung in Systemen, die ein schweres Bottom-Quark enthalten. Eine Vielzahl großer Experimente sammelt Daten hierzu. In Betrieb sind zur Zeit das Belle-Experiment an der Super B Factory des KEK in Tsukuba, Japan, sowie CLEO in Cornell und BaBar in Stanford, USA, um nur einige Beispiele zu nennen. Mit großem Interesse werden die Ergebnisse des LHCb-Experiments am CERN in Genf erwartet. Der Start dieses Projekts wird für Mitte 2008 erwartet. Es ist also von großem Interesse, präzise theoretische Vorhersagen für die Physik dieser Experimente zu treffen.

In [5] wurde eine Methode zur Berechnung der Masse des b-Quarks vorgestellt. Stark vereinfacht gesprochen parametrisiert man die Masse  $m_B$  des B-Mesons, einem gebundenen Zustand aus einem b-Quark und einem leichten Up- oder Down-Quark, mit der so genannten RGI-Masse  $M_b$  des b-Quarks. Der Schnittpunkt dieser Funktion  $m_B(M)$  mit dem experimentellen Wert der B-Mesonenmasse bestimmt dann  $M_b$ . Wie wir später sehen werden, ist allerdings diese Parametrisierung mit einem Aufwand verbunden und ein Teil des Fehlers in der Rechnung aus [5] resultiert aus dem Fehler im Parameter  $M$ . Hier soll eine alternative und möglicherweise genauere Strategie zu Fixierung von  $M$  vorgestellt und ausgeführt werden.

Wir werden zunächst einige einleitende Bemerkungen zur Formulierung der Quantenfeldtheorie auf einem Raumzeitgitter machen und uns dann der Heavy Quark Effective Theory widmen, die Berechnungen von Systemen aus einem schweren und einem leichten Quark erst möglich macht. Nachdem wir ei-

nige Worte zum Begriff der Quarkmasse verloren haben werden, führen wir das Schrödingerfunktionalschema ein, welches uns bei der Berechnung physikalischer Systeme in einem endlichen Volumen helfen wird. Dieses werden wir ebenfalls auf ein Raumzeitgitter übertragen und dann die in [5] verwendete Strategie in einer etwas vereinfachten Version rekapitulieren. Schließlich stellen wir die neue Strategie vor und wenden sie an.

Im Laufe dieser Arbeit ist eine C++-Klasse erstellt worden, die eine komfortable Auswertung von Monte-Carlo-Daten ermöglicht. Eine Dokumentation der in der Arbeit verwendeten Version ist in Anhang B zu finden. Es ist geplant, die Entwicklung noch etwas voranzutreiben.

## 2. Quantenfelder auf dem Gitter

Sicherlich ist der Leser mit der Quantenchromodynamik, kurz QCD, der Theorie der starken Kernkraft in Gitterformulierung eingehend vertraut. Dennoch möchten wir nicht auf eine knappe Darstellung der theoretischen Grundlagen der Physik, mit der sich diese Arbeit befasst, verzichten. Unser Ziel hierbei ist, dass unsere Darstellungen abgerundet und so weit wie möglich selbstkonsistent sind. Eine detaillierte Einführung ist zum Beispiel in [17] zu finden.

### 2.0.1. Natürliche Einheiten

Wir werden in der kompletten Arbeit „natürliche Einheiten“ verwenden, d.h. wir setzen für die Lichtgeschwindigkeit  $c$  und das Plancksche Wirkungsquantum  $\hbar$

$$\hbar = c = 1. \quad (2.0.1)$$

Mit einer einfachen Dimensionsanalyse können jederzeit die weggelassenen Faktoren von  $\hbar$  und  $c$  rekonstruiert werden.

### 2.1. Die Dirac-Gleichung

Auf der Suche nach einer quantenmechanischen Wellengleichung, deren Lösungen der speziellen Relativitätstheorie genügen sollten und die die Schrödinger-Gleichung als Grenzfall besäße, formulierte Paul Dirac im Jahre 1928 die Gleichung

$$i\gamma_\mu \partial_\mu \psi - m\psi = 0. \quad (2.1.1)$$

Die Lösungen  $\psi$  der klassischen Dirac-Gleichung sind vierkomponentige Wellenfunktionen. In Anwesenheit eines an diese koppelnden Feldes  $A_\mu$  fand Dirac die Gleichung

$$(\gamma^\mu (\partial_\mu + ieA_\mu) + im)\psi = 0. \quad (2.1.2)$$

Unter Hinzunahme der Maxwellschen Gleichungen für das Feld  $A_\mu$  erhält man hieraus die Quantentheorie des Elektromagnetismus, die Quantenelektrodynamik, QED. Die Theorie der starken Kernkraft formuliert man analog, allerdings unter Hinzunahme eines Flavor-Index  $a$  der Felder.

#### Quantisierung

Versucht man nun, die Dirac-Gleichung analog zur Quantenmechanik zu quantisieren, indem man Kommutatoren für die Felder fordert, gerät man in Schwierigkeiten. Es stellt sich unter anderem heraus, dass der Propagator in diesem Falle

außerhalb des Lichtkegels nicht Null ist, die Lösungen sich also mit Geschwindigkeiten größer als die Lichtgeschwindigkeit ausbreiten können. Um dies zu beheben fordert man die Antikommurationsrelationen

$$\{\psi_a(\vec{x}), \psi_b^\dagger(\vec{y})\} = \delta(\vec{x} - \vec{y})\delta_{ab}, \quad (2.1.3)$$

$$\{\psi_a(\vec{x}), \psi_b(\vec{y})\} = \{\psi_a^\dagger(\vec{x})\psi_b^\dagger(\vec{y})\} = 0. \quad (2.1.4)$$

Variablen, die Antikommurationsregeln gehorchen, nennt man Grassmann-Variablen.

## 2.2. Das Pfadintegral

Alternativ zum Aufstellen von Bewegungsgleichungen lässt sich die Quantenmechanik auch mit Hilfe eines so genannten Pfadintegrals formulieren.

Ist für ein System der Hamiltonoperator gegeben durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (2.2.1)$$

so lässt sich die Übergangsamplitude  $\mathcal{U}$  vom Ort  $x_a$  zu einem anderen  $x_b$  in der Zeit  $T$  berechnen mit

$$\mathcal{U}(x_a, x_b; T) = \langle x_b | e^{-iHT} | x_a \rangle. \quad (2.2.2)$$

Wenn man nun  $T$  in  $n$  gleiche Stücke der Länge  $\Delta t$  teilt, und  $(n - 1)$  vollständige Sätze von Eigenzuständen zu  $H$  einschiebt, erhält man

$$\mathcal{U}(x_a, x_b; T) = \int dx_1 \dots \int dx_{n-1} \langle x_b | e^{-iH\Delta t} | x_{n-1} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-iH\Delta t} | x_a \rangle. \quad (2.2.3)$$

Nutzt man nun die Tatsache aus, dass bei genügend großem  $n$  der Wert  $\Delta t$  hinreichend klein ist, stellt nach der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel die Gleichung

$$\langle x_{i+1} | e^{-iH\Delta t} | x_i \rangle \approx \langle x_{i+1} | e^{-i\Delta t p^2/(2m)} | x_i \rangle e^{-iV(x_i)\Delta t} \quad (2.2.4)$$

eine gültige Approximation dar. Damit erhält man

$$\langle x_{i+1} | e^{-iH\Delta t} | x_i \rangle \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\Delta t}} \exp \left\{ i\Delta t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} \right)^2 - V(x_i) \right] \right\}. \quad (2.2.5)$$

Mit Gleichung (2.2.3) errechnet man daraus für die Übergangsamplitude

$$\mathcal{U}(x_a, x_b; T) \approx \int \frac{dx_1 \dots dx_{n-1}}{\left( \frac{2\pi i\Delta t}{m} \right)^{n/2}} \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{i=0} \Delta t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} \right)^2 - V(x_i) \right] \right\}. \quad (2.2.6)$$

Wenn man nun den Grenzwert  $n \rightarrow \infty$  bildet, wird der Exponent in (2.2.6) zur klassischen Wirkung  $S$  des Systems für einen Weg von  $x_a$  nach  $x_b$  in der Zeit  $T$ . Mit der Notation

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \Delta t} \right)^{n/2} dx_1 \dots dx_{n-1} =: \mathcal{D}x \quad (2.2.7)$$

kann man  $\mathcal{U}$  kompakt schreiben als

$$\mathcal{U}(x_a, x_b; T) = \int \mathcal{D}x e^{iS}. \quad (2.2.8)$$

Das Integral  $\int \mathcal{D}x$  lässt sich als eine Integration über alle Pfade  $x(t)$  mit  $x(t=0) = x_a$  und  $x(t=T) = x_b$ , sowie den Punkten  $x(i\Delta t) = x_i$ , auffassen. Betrachtet man  $\vec{x}$  als Raumpunkt in drei Dimensionen, kann man abkürzend schreiben

$$\mathcal{D}x = \prod_{t,i} dx_i(t). \quad (2.2.9)$$

### Das Pfadintegral für die Quantenfeldtheorie

In der Quantenfeldtheorie geht man zur Betrachtung von Feldamplituden  $\phi(\vec{x}, t)$  über, anstatt  $x_i(t)$  als möglichen Aufenthaltsort für ein einzelnes Teilchen zu interpretieren. Wir werden in den folgenden Überlegungen von einem Skalarfeld  $\phi$  ausgehen. Alle Herleitungen lassen sich auch für ein Spinorfeld  $\psi$  durchführen, wobei man allerdings berücksichtigen muss, dass  $\psi$  eine antikommutierende Größe ist. Eine Quantenfeldtheorie wird vollständig beschrieben durch ihre Greensfunktionen

$$G(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle 0 | \phi(x_1) \phi(x_2), \dots, \phi(x_n) | 0 \rangle. \quad (2.2.10)$$

Mit Hilfe von Analogieschlüssen kann man das Pfadintegral der Quantenmechanik, Gleichung (2.2.8), in eine Pfadintegralformulierung für die Quantenfeldtheorie übersetzen, indem man die Ersetzungen

$$x_i(t) \rightarrow \phi(\vec{x}, t), \quad (2.2.11)$$

$$i \rightarrow \vec{x}, \quad (2.2.12)$$

$$\prod_{t,i} dx_i(t) \rightarrow \prod_{t,\vec{x}} d\phi(\vec{x}, t) =: \mathcal{D}\phi, \quad (2.2.13)$$

$$S = \int dt L \rightarrow S = \int dt d^3x \mathcal{L}, \quad (2.2.14)$$

vornimmt.  $\mathcal{L}$  steht hierbei für die Lagrangedichte der betrachteten Theorie. Zum Beispiel erhält man mit dem Variationsprinzip aus Gleichung (2.1.2) die Lagrangedichte der QCD,

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu}. \quad (2.2.15)$$

Hier ist  $D_\mu = \partial_\mu + igT_a A_\mu^a$  die kovariante Ableitung und  $F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu F_\nu^a - \partial_\nu F_\mu^a - g f_{abc} F_\mu^b F_\nu^c$  die Chromomagnetische Feldstärke.

Die Herleitung des Pfadintegrals in Quantenfeldtheorie lässt sich mehr oder weniger analog zum letzten Abschnitt vornehmen. Bei der Definition des Integrationsmaßes (2.2.13) stößt man allerdings auf Schwierigkeiten. Wir wollen uns hier mit den oben genannten Analogien zufrieden geben und schreiben

$$G(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \dots \phi(x_n) e^{iS}, \quad (2.2.16)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{iS}. \quad (2.2.17)$$

Hier fällt auf, dass bei einer Berechnung von (2.2.16) die Oszillationen im Exponenten ein Problem darstellen könnten. Um dieses Problem zu umgehen, bedient man sich eines Tricks.

### Euklidsche Quantenfeldtheorie

Die Greensfunktionen (2.2.10) lassen sich zu imaginären Zeiten,  $t = -i\tau$ , fortsetzen,

$$G_E(x_1, \dots, x_n) = G_E((\vec{x}_1, \tau_1), \dots, (\vec{x}_N, \tau_n)) = G((\vec{x}_1, -i\tau_1), \dots, (\vec{x}_n, -i\tau_n)), \quad (2.2.18)$$

sie heißen dann Schwinger-Funktionen. Die Pfadintegraldarstellung der Schwinger-Funktionen lautet

$$G_E(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \dots \phi(x_n) e^{-S_E}, \quad (2.2.19)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E}. \quad (2.2.20)$$

$S_E$  ist die entsprechend für imaginäre Zeit geschriebene Wirkung. Die ursprünglichen Greensfunktionen  $G$  lassen sich durch Rücktransformation, eine so genannte Wick-Rotation, aus den Schwinger-Funktionen  $G_E$  erhalten. Allerdings lässt sich das Pfadintegral für  $G_E$  leichter auswerten.  $S_E$  ist reell und nach unten beschränkt, das Pfadintegral ist also ein hochdimensionales Gauss-Integral. Die Metrik für Raumzeitpunkte mit gemäß  $t = -i\tau$  transformierter Zeitkomponente ist eine euklidsche. Daher nennt man diese Formulierung der Quantenfeldtheorie auch die euklidsche Formulierung.

## 2.3. Quantenfeldtheorie auf dem Gitter

Wie bereits erwähnt, bereitet die mathematische Definition des Integrationsmaßes  $\mathcal{D}\phi$  einige Schwierigkeiten. Weiter muss die Quantenfeldtheorie noch regularisiert werden, d.h. man muss einen Energiecutoff einführen, wenn man physikalische Vorhersagen treffen will. Wie sich herausstellt, lassen sich diese beiden Aufgaben lösen, indem man die Quantenfeldtheorie auf ein Raumzeitgitter

$$L = \{ax \mid x \in \mathbb{Z}^4\} \quad (2.3.1)$$

mit Gitterkonstante  $a \in \mathbb{R}$  überträgt. Die Übertragung der Fermionfelder  $\phi$  ist nur die Einschränkung des Definitionsbereichs

$$\phi \rightarrow \phi(x) \quad x \in L. \quad (2.3.2)$$

Die Ableitung wird zu einer Differenz,

$$\partial_\mu \phi \rightarrow \frac{1}{a}(\phi(x + a\hat{\mu}) - \phi(x)), \quad (2.3.3)$$

und das Integrationsmaß vereinfacht sich zu einem diskreten Produkt

$$\mathcal{D}\phi \rightarrow \prod_{x \in L} d\phi(x). \quad (2.3.4)$$

Betrachtet man die Fouriertransformierte des Feldes  $\phi$ ,

$$\tilde{\phi}(p) = \sum_x a^4 e^{-ipx} \phi(x), \quad (2.3.5)$$

so erkennt man die Periodizität unter Transformationen  $p_\mu \rightarrow p_\mu + 2\pi/a$ . Man kann sich also auf Impulse der ersten Brillouin-Zone beschränken und fordern

$$-\frac{\pi}{a} \leq p_\mu < \frac{\pi}{a}. \quad (2.3.6)$$

Die Formulierung auf dem Gitter stellt also schon eine Regularisierung dar. Es taucht allerdings mit dem Ersetzen der Ableitung durch eine endliche Differenz eine Schwierigkeit auf. Im kinetischen Term der Lagrangedichte werden Produkte von Feldern an verschiedenen Orten  $\phi(x)\phi(y)$  auftauchen. Diese Größe ist allerdings nicht lokal eichinvariant! Um die Eichinvarianz wiederherzustellen, muss man eine Matrix  $U(x, y)$  in  $SU(N)$ , mit Transformationsverhalten  $U(x, y) \rightarrow \Lambda(x)U(x, y)\Lambda^{-1}(y)$  unter Eichtransformationen  $\Lambda$  finden, sodass  $\phi(x)U(x, y)\phi(y)$  eichinvariant ist. Die Lösung hierzu ist die Matrix

$$U(x, y; \mathcal{C}) = P \exp \left( ig_0 \int_y^x A_\mu^a(z) T_a dz^\mu \right). \quad (2.3.7)$$

$\mathcal{C}$  ist der Integrationspfad von  $x$  nach  $y$  und  $P$  steht für die Pfadordnung. Man nennt  $U(x, y; \mathcal{C})$  auch den Paralleltransporter von  $x$  nach  $y$  entlang  $\mathcal{C}$ . Man führt in der Gitterquantenfeldtheorie für den Paralleltransporter entlang der Geraden von einem Gitterpunkt  $x + a\hat{\mu}$  zu seinem Nachbarn  $x$  die Kurzschreibweise  $U_{x\mu} := U(x + a\hat{\mu}, x)$  ein. Da  $U$  wie oben beschrieben das korrekte Transformationsverhalten hat, wird ein kinetischer Term der Form

$$\sum_{x, \mu} \phi(x + \hat{\mu}) U_{x\mu} \phi(x) \quad (2.3.8)$$

eichinvariant sein. Wenn man als Wirkung für das Eichfeld die Wilson-Wirkung

$$S_W = - \sum_p \frac{\beta}{N} \Re \text{Tr}(U(p)), \quad (2.3.9)$$

$$p = x\mu\nu, \quad (2.3.10)$$

$$U(p) = U_{x\mu\nu} = U_{(x+a\hat{\nu})(-\nu)} U_{(x+a\hat{\mu}+a\hat{\nu})(-\mu)} U_{x+a\hat{\mu})\nu} U_{x\mu}, \quad (2.3.11)$$

verwendet, sieht man mit der Näherung für den Paralleltransporter

$$U_{x\mu} \approx \exp \left( ig_0 a A_\mu^b T_b \right), \quad (2.3.12)$$

dass  $S_W$  mit  $\beta = 2N/g_0^2$  gegen die Yang-Mills-Wirkung konvergiert,

$$S_W = \frac{\beta g_0^2}{8N} \sum_x a^4 F_{\mu\nu}^b F_{\mu\nu}^b + \mathcal{O}(a^5). \quad (2.3.13)$$

Die Quantenfeldtheorie auf dem Gitter eignet sich sehr gut zur numerischen Auswertung, da sie nur Objekte enthält, die sich leicht auf einem Computer implementieren lassen. Sie wird während dieser Arbeit unser Hauptwerkzeug sein.

### 3. Heavy Quark Effective Theory (HQET)

Die QCD unter Berücksichtigung eines schweren Quarks, wie zum Beispiel des Bottom-Quarks, ist eine Problemstellung großer Wichtigkeit, aber auch großer Schwierigkeit. Das Interesse an Daten physikalischer Prozesse wie Zerfällen oder Kenngrößen von Zuständen mit anderen Generationen, die das B-Quark involvieren, röhrt daher, dass diese zur Bestimmung der Elemente der CKM-Matrix benötigt werden. Diese ist ein Schüssel zum Verständnis der CP-Verletzung in der Natur, welche eine zentrale Rolle bei wichtigen Problemen der modernen Physik spielt. Die große Masse des b-Quarks (siehe hierzu Tabelle 3.1) wirft bei

Generation	u	d	s
$m$ in MeV	1,5 - 3,0	3 - 7	$95 \pm 25$
Generation	c	b	t
$m$ in MeV	$1250 \pm 90$	$4200 \pm 70$	$174200 \pm 3300$

Tabelle 3.1.: Massen der verschiedenen Quarkgenerationen, aus [26]. Angegeben sind die  $\overline{\text{MS}}$ -Massen bei der Energieskala  $\mu \approx 2\text{GeV}$

der numerischen Behandlung auf dem Gitter besondere Probleme auf. Wie wir in Abschnitt 2 gesehen haben, führt die Gitterdiskretisierung mit Gitterabstand  $a$  einen Impulscutoff  $\sim a^{-1}$  ein. Da nur endliche Gitter der Länge  $L$  mit  $L/a$  Gitterpunkten simuliert werden können, führt dies zu einer Beschränkung der minimalen Gitterkonstante  $a$  und damit des maximalen auflösbaren Impulses. Die Masse des b-Quarks ist nun aber deutlich größer als die heutzutage in Simulationen zugänglichen inversen Gitterabstände, womit keine verlässlichen Simulationen möglich sind. Wir müssen also zur Beschreibung der Physik des b-Quarks auf eine effektive Theorie zurückgreifen. Man verwendet hierfür die Heavy Quark Effective Theory. Diese beinhaltet  $N_f - 1$  leichte, dynamische und ein schweres Quark, das in einer effektiven Theorie beschrieben wird. Eine unangenehme Konsequenz der so entwickelten Theorie besteht darin, dass die Parameter der HQET nichtperturbativ bestimmt werden müssen. Im Folgenden werden wir die Definition der HQET auf dem Gitter nachvollziehen und ihren Abgleich mit der QCD beschreiben. Hierbei werden wir uns weitgehend an [5] halten. Die Darstellungen zum Abgleich von HQET und QCD folgen weitestgehend [22].

### 3.0.1. Definition

Wir werden die Definition der HQET für  $N_f - 1$  leichte  $\psi_l$  und ein schweres Quark  $\psi_h$  auf dem Gitter angeben, indem wir von einer formellen  $1/m$ -Entwicklung der vollen Theorie ausgehen. Mit QCD werden wir uns im Folgenden immer auf die volle Theorie mit einem relativistischen schweren Quark beziehen, während HQET die nun zu definierende Theorie bezeichne. Wir werden bei den Ausführungen alle Terme, die ein schweres Antiquark enthalten, auslassen, da sie in volliger Analogie zu den entsprechenden Termen mit einem schweren Quark definiert sind. Die genaue Gestalt der Wirkung für die leichten Quarks  $\psi_l$  und Eichfelder  $A_\mu$  ist an dieser Stelle nicht wichtig, allerdings benötigt man für einige der folgenden Argumente eine  $O(a)$ -verbesserte Wirkung.  $C_{N_f}$  sei die Menge der Parameter der vollen Theorie. Diese wird neben der Eichkopplung  $g_0$  und den nackten Quarkmassen also auch einige Verbesserungskoeffizienten enthalten. Eichten und Hill zeigten in [6], dass sich eine effektive Theorie für  $N_f - 1$  leichte und ein schweres Quark der Masse  $m$  durch eine  $1/m$ -Entwicklung der betrachteten Operatoren schreiben lässt. Die Wirkung des schweren Quarks wird mit dem vierkomponentigen Feld  $\psi_h$  mit

$$P_+ \psi_h = \psi_h, \quad \bar{\psi}_h P_+ = \bar{\psi}_h, \quad P_+ = \frac{1}{2}(1 + \gamma_0), \quad (3.0.1)$$

notiert. Sie lautet unter Berücksichtigung von Termen bis einschließlich zur Ordnung  $1/m^n$

$$S_{HQET} = a^4 \sum_x \left\{ \mathcal{L}_{stat}(x) + \sum_{\nu=1}^n \mathcal{L}^{(\nu)}(x) \right\}, \quad (3.0.2)$$

$$\mathcal{L}_{stat}(x) = \bar{\psi}_h(x) [\nabla_0^* + \delta m] \psi_h(x), \quad (3.0.3)$$

$$\mathcal{L}^{(\nu)}(x) = \sum_i \omega_i^{(\nu)} \mathcal{L}_i^{(\nu)}(x), \quad (3.0.4)$$

wobei  $\nabla_\mu^*$  für die Rückwärtsableitung steht. Der Koeffizient  $\delta m$  des Gegenterms  $\bar{\psi}_h(x) \psi_h(x)$  hat Massendimension eins und muss nichtperturbativ bestimmt werden, wie wir später sehen werden. Die Felder  $\mathcal{L}_i^{(\nu)}$  haben Massendimension  $4 + \nu$ . Man findet auf klassischem Niveau bis einschließlich zur Ordnung  $1/m$

$$\delta m = 0 \quad (3.0.5)$$

$$\mathcal{L}_1^{(1)} =: \mathcal{O}_{spin} = \bar{\psi}_h \left( -\frac{1}{2} \sigma \cdot \mathbf{B} \right) \psi_h, \quad \omega_1^{(1)} = \frac{1}{m}, \quad (3.0.6)$$

$$\mathcal{L}_2^{(1)} =: \mathcal{O}_{kin} = \bar{\psi}_h \left( -\frac{1}{2} \mathbf{D}^2 \right) \psi_h, \quad \omega_2^{(1)} = \frac{1}{m}. \quad (3.0.7)$$

Hier ist  $\mathbf{B}$  eine diskretisierte Version des chromomagnetischen Feldstärketensors und  $\mathbf{D}^2$  die Gitterversion des kovarianten Laplaceoperators in drei Dimensionen. Ein Faktor  $m \bar{\psi}_h(x) \psi_h(x)$  wurde hierbei weggelassen, da er nur eine Energieverschiebung aller Zustände mit einem schweren Quark bewirkt. Das Entfernen dieses

Terms macht die Unabhängigkeit der Dynamik von B-Mesonen, also gebundenen Zuständen mit einem schweren und einem leichten Quark, von  $m$  in erster Ordnung der  $1/m$ -Entwicklung explizit. Allgemeine quantenmechanische Erwartungswerte einer Observablen  $\mathcal{O}$  werden über ein Pfadintegral definiert. Dieses lautet

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[\phi] \mathcal{O}[\phi] e^{-(S_{rel} + S_{HQET})}, \quad (3.0.8)$$

$$Z = \int \mathcal{D}[\phi] e^{-(S_{rel} + S_{HQET})}. \quad (3.0.9)$$

Hierbei wird in der effektiven Theorie der Integrand des Pfadintegrals durch eine Reihe in  $1/m$  ersetzt. Dies bedeutet, dass man neben der Entwicklung des Operators (mit Koeffizienten  $\alpha_i^{(\nu)}$ ) die Substitution

$$\exp\{-(S_{rel} + S_{HQET})\} = \exp \left\{ -a^4 \sum_x (\mathcal{L}_{stat}(x) + \mathcal{L}_{light}(x)) \right\} \times \left\{ 1 - a^4 \sum_x \mathcal{L}^{(1)}(x) + \frac{1}{2} \left[ a^4 \sum_x \mathcal{L}^{(1)} \right]^2 - a^4 \sum_x \mathcal{L}^{(2)}(x) + \dots \right\} \quad (3.0.10)$$

vornimmt. Terme der Ordnung  $1/m$  tauchen also nur in Form von Operatoren  $\mathcal{O}_i^{(\nu)}(x)$  auf, die als Einsetzungen in Korelationsfunktionen erscheinen. Der Erwartungswert, also das Integral, wird mit der gesamten Wirkung in der statischen Näherung für das schwere Quark, nämlich  $S = S_{rel} + a^4 \sum_x \mathcal{L}_{stat}(x)$  berechnet.

Zusammenfassend kann man für beliebige Erwartungswerte von Funktionen von Feldern  $\mathcal{O}$  bis zur ersten Ordnung in  $1/m$  schreiben:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \mathcal{O} \rangle_{stat} + \omega_{kin} a^4 \sum_x \langle \mathcal{O} \mathcal{O}_{kin}(x) \rangle_{stat} + \omega_{spin} a^4 \sum_x \langle \mathcal{O} \mathcal{O}_{spin}(x) \rangle_{stat} \quad (3.0.11)$$

$$=: \langle \mathcal{O} \rangle_{stat} + \omega_{kin} \langle \mathcal{O} \rangle_{kin} + \omega_{spin} \langle \mathcal{O} \rangle_{spin}. \quad (3.0.12)$$

Hierbei steht  $\langle \mathcal{O} \rangle_{stat}$  für den Erwartungswert bezüglich der Lagrangedichte  $\mathcal{L}_{stat} + \mathcal{L}_{light}$ .

### 3.1. Renormierbarkeit

Wenden wir uns nun der Frage der Renormierbarkeit der HQET zu. Das Abzählen der Potenzen der Quarkfelder lässt zunächst vermuten, dass die statische Theorie renormierbar ist. Man sollte einen Kontinuumsliches erhalten, nachdem man eine endliche Anzahl an Parametern fixiert. Diese erste Annahme wird sowohl durch störungstheoretische als auch nichtperturbative Rechnungen unterstützt, diese Ergebnisse sind in [2, 7, 12, 13] und [8] zu finden. Würden wir einen der  $1/m$ -Terme im Exponenten belassen, so wäre die Theorie nicht renormierbar. Dies ist in der NRQCD der Fall.

Wenden wir uns der Renormierung von allgemeinen Erwartungswerten vom Typ (3.0.8) zu, nachdem die Entwicklung (3.0.10) eingesetzt wurde. Wir wollen hierbei annehmen, dass die Entwicklungen der Operatoren in der effektiven Theorie bei der Ordnung  $n$  abgebrochen wurden. Nach den obigen Überlegungen ist ersichtlich, dass dies der Renormierung zusammengesetzter lokaler Operatoren in der statischen Näherung der effektiven Theorie entspricht. Sind also alle lokalen Operatoren renormiert, deren Dimension  $\nu$  kleiner der des höchstdimensionalen Operators ist ( $\nu \leq n$ ) und die die nötigen Symmetrien besitzen, können deren Koeffizienten so gewählt werden, dass die Erwartungswerte einen Kontinuumslimes besitzen. Bei dieser Prozedur müssen freilich sowohl die entsprechenden Terme  $\mathcal{L}^{(\nu)}(x)$  der Wirkung als auch die der effektiven Operatoren  $\mathcal{O}^{(\nu)}(x)$  berücksichtigt werden.

Die Menge der Parameter der effektiven Theorie werde mit  $C_{HQET}$  bezeichnet. Diese besteht aus den Parametern  $C_{N_f}$  der vollen Theorie, sowie den Koeffizienten  $\delta m$  und  $\omega_i^{(\nu)}$  aus der Entwicklung der Wirkung und den Koeffizienten  $\alpha_i^{(\nu)}$  der Entwicklung der betrachteten Operatoren. Die effektive Theorie ist nun renormiert, falls die Koeffizienten  $c_k \in C_{HQET}$  durch Vergleich von Erwartungswerten in renormierter QCD bestimmt wurden, die selbst schon renormiert sind.

### Die Notwendigkeit nichtperturbativer Renormierung

In der HQET kommt es zur Mischung von Operatoren, deren Dimension sich um  $p$  unterscheidet. Dies führt zu Divergenzen der Ordnung  $a^{-p}$ . Würden wir nun die Parameter  $c_k$  in Störungstheorie  $l$ -ter Ordnung in  $g_0$  bestimmen, würden die Fehler sich verhalten wie

$$\Delta c_k \sim g_0^{(l+2)} a^{-p} \sim a^{-p} [\ln(a\Lambda)]^{-(l/2+1)} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \infty. \quad (3.1.1)$$

Hierbei ist  $\Lambda$  der renormierungsgruppeninvariante  $\Lambda$ -Parameter der QCD. Mit anderen Worten heißt dies, dass wir die Existenz eines Kontinuumslimes in HQET nur dann erwarten können, falls die Elemente aus  $C_{HQET}$  zu gegebener Ordnung in  $1/m$  nichtperturbativ bestimmt wurden. Dies ist ein sehr wichtiger Aspekt der HQET.

## 3.2. Abgleichen von HQET und QCD

Ziel ist es nun, die Parameter in  $C_{HQET}$  so zu wählen, dass die resultierende Theorie eine gültige Approximation an die QCD darstellt. Wie eben erklärt, muss dies nichtperturbativ geschehen, damit die Existenz des Kontinuumslimes sichergestellt ist. Nach dieser Prozedur sollte man für ausgewählte Observable  $\Phi^{HQET}$ , die nur solche Größen erhalten, die bei der Bestimmung von  $C_{HQET}$  berücksichtigt wurden und deren zugeordneten Observablen  $\Phi^{QCD}$  in QCD einen Zusammenhang der Form

$$\Phi^{HQET}(M) = \Phi^{QCD}(M) + O\left(\frac{1}{M^{(n+1)}}\right) \quad (3.2.1)$$

erwarten. Hier wurde angenommen, dass die entscheidende Abhangigkeit der Observablen  $\Phi$  die schwere Quarkmasse ist, die hier als renormierungsgruppeninvariante Quarkmasse  $M$  geschrieben wurde. Eine kurze Einführung zum Begriff der RGI-Masse ist in Kapitel 4 zu finden.  $\Phi$  wird in der Regel aber von mehr Parametern als der RGI-Quarkmasse abhangen. Allerdings nimmt man an, dass alle anderen Abhangigkeiten von  $\Phi^{QCD}$  klein im Vergleich zur  $M$ -Abhangigkeit sind. Weiter steckt hinter der Wahl von  $M$  als Abhangigkeit auch die Tatsache, dass hiermit (3.2.1) unabhangig vom verwendeten Renormierungsschema ist.

Wenden wir uns nun dem eigentlichen Problem des Abgleichs von HQET und QCD zu. Wir konnen die Parameter  $c_k$  der HQET bestimmen, indem wir ebensoviele Observable  $\Phi_k$  wie Parameter wahlen und zur Bestimmung letzterer die  $N_n$ <sup>1</sup> Bedingungen

$$\Phi_k^{HQET}(M) = \Phi_k^{QCD}(M), \quad k = 1, \dots, N_n \quad (3.2.2)$$

aufstellen. Hierbei ist naturlich nicht unbedingt jede Gleichung die Abgleichbedingung fur einen Parameter  $c_k$ . Vielmehr erhalten wir  $N_n$  Gleichungen, in denen ebenso viele Unbekannte vorkommen. Man muss hier also sicherstellen, dass die Observablen  $\Phi$  so gewahlt sind, dass das Gleichungssystem (3.2.2) eine Losung besitzt.

Aus theoretischer Sicht sind wir an diesem Punkt fertig. Wir haben die HQET definiert und Abgleichbedingungen (3.2.2) aufgestellt, die die Äquivalenz zur QCD sicherstellen. Man hat aber die gesamte beschriebene Ubung nur angestellt, um Schwer-Leicht-Systeme, die sich einer direkten Behandlung entziehen, numerischen Simulationen zuganglich zu machen. Im Prinzip konnte man fur die Observablen  $\Phi_k^{QCD}$  Vorhersagen aus Experimenten heranziehen. Hiermit wurde sich allerdings die Vorhersagekraft der resultierenden Theorie verringern, da in den Parametern  $C_{HQET}$  ja neben den Parametern der QCD noch Verbesserungs- und Entwicklungskoeffizienten enthalten sind. Je hoher wir die Ordnung  $n$  der Entwicklung wahlen, desto mehr Parameter besitzt die effektive Theorie und umso mehr Koeffizienten mussen bestimmt werden. Wir konnen weitaus geschickter vorgehen, indem wir die QCD auf einem Gitter mit Hilfe experimenteller Vorhersagen renormieren und dann in Gittersimulationen Vorhersagen fur die Observablen  $\Phi$  treffen. Scheinbar werfen wir aber hiermit unser ursprungliches Problem wieder auf. Um den Abgleich von QCD und HQET nach Gleichung (3.2.2) vorzunehmen, mussten wir Berechnungen in QCD mit einem relativistischen schweren Quark vornehmen, was wir ursprunglich ja vermeiden wollten. Wir benotigen hier also eine zusatzliche Technik, die im nachsten Abschnitt vorgestellt werden soll.

Man sollte noch anmerken, dass bei einer Erhohung der Ordnung  $n$  der Entwicklung nicht nur neue Koeffizienten  $c_k$  zu  $C_{HQET}$  hinzukommen. Es werden sich auch einige der ursprunglichen Koeffizienten der Entwicklung niedrigerer Ordnung ndern. Dies ist ein Effekt des Mischens von Operatoren verschiedener Ordnung.

---

<sup>1</sup>Das Subskript  $n$  bezeichnet die Ordnung, an der die  $1/m$ -Entwicklung abgebrochen wurde.  $N_n$  ist die Anzahl der Parameter, die in der Entwicklung  $n$ -ter Ordnung fixiert werden mussen.

Im Prinzip könnte man auch anstatt Gleichung (3.2.2) im Kontinuum zu betrachten, die Abgleichbedingung bei einer endlichen Gittergröße  $L$  betrachten. Dies ist der Schlüssel zum Erfolg, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden.

### 3.3. Abgleich in endlichem Volumen

Die Grundannahme, auf der die im folgenden dargestellte Technik basiert ist die Gültigkeit der QCD und der HQET in endlichem Volumen und die Unabhängigkeit der Parameter vom Volumen. Diese ist allgemein als eine gültige und vernünftige Annahme anerkannt und so weit dies möglich ist überprüft.

Wir ändern wie es im letzten Abschnitt schon angedeutet wurde Gleichung (3.2.2) dahingehend ab, dass der Abgleich nun in einem endlichen Volumen stattfinde. Wir erhalten also die neuen Abgleichbedingungen

$$\Phi_k^{HQET}(L, M) = \Phi_k^{QCD}(L, M), \quad k = 1, \dots, N_n. \quad (3.3.1)$$

Wir können bei nicht zu groß gewähltem  $L$ , etwa mit  $L \approx 0.2 \text{ fm}$  den Kontinuums-limes auf der linken Seite nehmen, wenn die Observablen geschickt gewählt sind. Auf der rechten Seite von Gleichung (3.3.1) sind allerdings große Diskretisierungsfehler zu erwarten, wenn man die Auflösung  $L/a$  des Gitters zu grob wählt. Es stellt sich nun heraus, dass bei der heute zur Verfügung stehenden Rechenleistung keine genügend feine Auflösung gewählt werden kann, um die Fehler tatsächlich unter Kontrolle zu halten. Eine Reduzierung des Volumens durch Verkleinerung von  $L$  lässt sich natürlich ab einem gewissen Punkt ebenfalls nicht mehr realisieren, da jede Observable  $\Phi$  eine typische Wechselwirkungslänge hat, unterhalb der ihre Definition in einem endlichen Volumen schlichtweg keinen Sinn mehr macht.

Wir benötigen also noch ein Werkzeug, mit dessen Hilfe wir unseren Abgleich nun letztendlich realisieren können.

#### 3.3.1. Schrittweise Skalierung

Das grundlegende Problem ist das Auftreten von Diskretisierungsfehlern, da uns bei gegebenem Gitterabstand  $a$  nicht die Ressourcen zur Verfügung stehen, Gitter genügender Ausdehnung  $L$  zu simulieren. Die Lösung liegt nun darin, sich die auftretenden Artefakte des endlichen Volumens zu Nutze zu machen. Man betrachtet die Veränderung einer in endlichem Volumen definierten Observablen im Kontinuum bei Vergrößerung des Volumens um den Faktor  $s$ . Hierzu definiert man zunächst die Skalierungsfunktionen<sup>2</sup>  $\sigma_k$  als

$$\Phi_k^{HQET}(sL, M) = \sigma_k \left( \Phi_0^{HQET}(L, M), \dots, \Phi_{N_n}^{HQET}(L, M) \right). \quad (3.3.2)$$

Hierbei wird angenommen, dass alle Observablen durch eventuelle Multiplikation mit der entsprechenden Potenz von  $L$  dimensionslos gemacht wurden.

---

<sup>2</sup>In der englischsprachigen Literatur wird die Skalierungsfunktion  $\sigma$  mit „step scaling function“ bezeichnet.

Bei einer Berechnung auf dem Gitter wird  $\sigma_k$  noch eine Abhängigkeit von der Gitterauflösung  $a/L$  aufweisen. Typischerweise berechnet man daher  $\sigma_k$  folgendermaßen: Zunächst wählt man einige Gitterauflösungen  $a/L$ . Bei diesen simuliert man nun die gewünschten Observablen. Darauf werden bei den *gleichen* Simulationsparametern Gitter mit der skalierten Größe  $sL$  berechnet. Dies ergibt die Gitterskalierungsfunktion  $\Sigma_k(a/L)$  zu verschiedenen Auflösungen  $a/L$ . Schließlich bestimmt man den Kontinuumslimits, indem man anhand der berechneten  $\Sigma_k(a/L)$  den Grenzwert  $a/L \rightarrow 0$  bildet.

Für die praktische Durchführung dieser Berechnung ist es selbstverständlich wichtig, dass man die Observablen  $\Phi_i^{HQET}$  derart wählt, dass  $\sigma_k$  von möglichst wenigen  $\Phi_j^{HQET}$  mit  $j \neq k$  abhängt, sodass diese bei der konkreten Berechnung erst gar nicht berücksichtigt werden müssen. Um ein konkretes Beispiel hierfür zu nennen sei erwähnt, dass man üblicherweise als  $\Phi_1^{HQET}(L, M)$  die renormierte Kopplung  $\bar{g}^2(L)$  wählt und bei der Berechnung der Skalierungsfunktion die Quarkmassen des leichten Sektors gleich Null wählt. Die zweite Abgleichbedingung lautet somit

$$\Phi_2^{HQET}(L, M) = \bar{m}_l = 0. \quad (3.3.3)$$

Hiermit lassen sich die  $g_0^2$  sowie die leichten Quarkmassen unabhängig von den Parametern  $\delta m, \alpha_i, \omega_i, \dots$  fixieren, da letztere ja nur aus dem schweren Quarksektor stammen.

Der Kernaspekt dieser Technik ist, dass man durch Iteration der Gleichung (3.3.2) nun große Volumen erreichen kann, ohne diese tatsächlich bei hoher Auflösung simulieren zu müssen. Wenn nun einige Iterationen – in der Regel sind bei einem typischen Skalierungsfaktor von  $s = 2$  zwei oder drei hinreichend – durchgeführt wurden, kann mit Hilfe von Gleichung (3.3.1) nun der Abgleich zwischen QCD und HQET stattfinden. Wie groß das Abgleichvolumen nun gewählt wird, ist zu einem Teil willkürlich. Die folgende Überlegung führt uns jedoch zu einer Abschätzung der minimalen Größe des Abgleichvolumens: Wir haben die HQET durch eine  $1/m$ -Entwicklung gewonnen, die bei einer gegebenen Ordnung  $n$  abgebrochen wurde. Es ist also darauf zu achten, dass die Observablen, die für den Abgleich herangezogen werden, eine Dynamik besitzen, bei der diese Entwicklung gültig und wohldefiniert ist. Wählen wir die Observablen ungeschickt, sodass sie mit großen Fehlern behaftet sind, wird auch unser Resultat fehlerhaft sein. Insbesondere muss also das Abgleichvolumen  $L_0$  so gewählt werden, dass die  $1/m$ -Entwicklung ihre Gültigkeit behält. Aus diesem Grunde sollte man sicherstellen, dass

$$1/L_0 \ll m \quad (3.3.4)$$

gilt. In der Praxis haben sich Werte von  $L_0 \approx 0.2 \text{ fm} - 0.4 \text{ fm}$  bewährt.

### 3.3.2. Physikalische Observable in der effektiven Theorie

Will man nun in der effektiven Theorie physikalische Observable berechnen, muss dies in großem Volumen geschehen, wenn man überprüfbare Vorhersagen treffen

will. Dies bedeutet, dass man ein  $K$  wählt, sodass das größte beim Abgleich betrachtete Gitter eine Größe von

$$L_K = s^K L_0 \approx 1 \text{ fm} \quad (3.3.5)$$

besitzt. Dies bedeutet aus praktischen Gesichtspunkten die Wahl von Gitterabständen  $a$  zwischen  $1/20 \text{ fm}$  und  $1/10 \text{ fm}$ . Bei diesen Gitterabständen können nun mit den heute verfügbaren Rechnern physikalisch große Systeme berechnet werden.

Wendet man nun die Gleichung (3.3.2) rekursiv an, gelangt man zu Gleichungen, die die Observablen

$$\Phi_k^{HQET}(L_k, M) = V_k \quad (3.3.6)$$

im großen Volumen  $L_K^4$  beschreiben. Nun simuliert man ein Gitter eben dieser Größe mit einer geringeren Auflösung von  $L_k/a = O(10)$ , wobei die Gleichung (3.3.6) nun zur Fixierung der nackten Parameter  $C_{HQET}$  dient. Ist dies geschehen, kann man nun in der Effektiven Theorie in großem Volumen Korellatoren berechnen, von denen sich physikalische Größen wie Massen und Matrixelemente ableiten lassen. Das ursprüngliche Ziel dieses Kapitels ist somit erreicht. In Abbildung 3.1 wird die Abgleichprozedur anschaulich zusammengefasst.

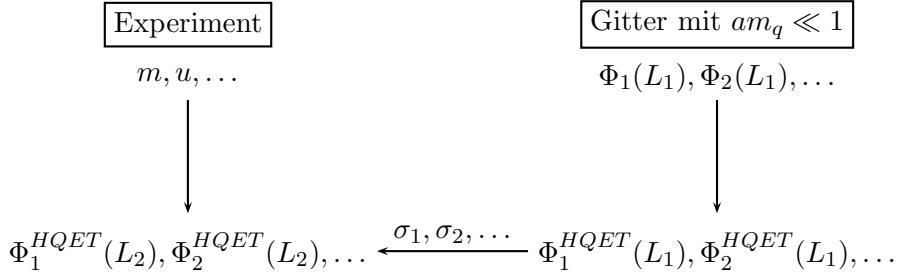


Abbildung 3.1.: Illustration zum Abgleich zwischen HQET und QCD. Lose angelehnt an eine ähnliche Abbildung in [5].

# 4. Die Quarkmasse und ihre Bedeutung

Im Folgenden werden wir eine kurze Einführung zum Begriff der Quarkmasse geben. Wie die Kopplung ist in der QCD die Masse eines Quarks zunächst nur ein freier Parameter in der Lagrangedichte. In der Natur kommen freie Quarks aufgrund des Confinements nicht vor, was die Frage nach der Bedeutung der Masse eines Quarks noch erschwert.

Wir werden sehen, dass die Quarkmasse eine sinnvolle Bedeutung nur in der Form einer renormierten Größe erhalten kann, damit also eine Skalenabhängigkeit erhält. Im zweiten Unterabschnitt werden wir den Begriff der renormierungsgruppeninvarianten (RGI) Quarkmasse kennenlernen, die unabhängig von der Energieskala ist.

## 4.1. Die PCAC-Masse

Genau wie bei der Definition der renormierten Kopplungskonstante hat man bei der Definition der renormierten Quarkmassen eine gewisse Freiheit. Wir wollen eine mögliche Definition einer Quarkmasse für QCD mit einem Quarkflavor geben. Ein weit verbreiteter Ansatz geht von der PCAC-Relation aus. Diese verwendet den Axialvektorstrom

$$A_\mu^a(x) = \bar{\psi}(x) \gamma_5 \gamma_\mu \frac{1}{2} \tau^a \psi(x) \quad (4.1.1)$$

und setzt seine Divergenz in Beziehung zur pseudoskalaren Dichte

$$P^a(x) = \bar{\psi}(x) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^a \psi(x). \quad (4.1.2)$$

Divergenz des Axialvektorstroms und die pseudoskalare Dichte sind nun proportional zueinander, wobei die Proportionalitätskonstante gerade die doppelte nackte Quarkmasse  $m$  ist. Es gilt

$$\partial_\mu A_\mu^a(x) = 2m P^a(x). \quad (4.1.3)$$

Diese Identität lässt sich leicht ableiten, dies ist zum Beispiel in [18] zu finden. Will man nun  $A_\mu$  und  $P$  renormieren, schreibt man

$$(A_R)_\mu^a = Z_A A_\mu^a, \quad (4.1.4)$$

$$P_R^a = Z_P P^a. \quad (4.1.5)$$

Die Renormierungskonstante  $Z_A$  ist dabei nur auf dem Gitter zu berücksichtigen. Im Kontinuum ist die Lagrangedichte der QCD für verschwindende Quarkmassen

symmetrisch unter SU(2) Flavor-Transformationen, was auf die Gleichungen der Strömungsalgebra führt. Diese stellen nun sicher, dass  $A_\mu^a$  nicht renormiert werden muss. Die Formulierung der QCD auf einem Raumzeitgitter bricht aber die Flavor-Symmetrie durch Terme der Ordnung der Gitterkonstanten  $a$ . Dies führt auf eine multiplikative Renormierung. Man kann  $Z_A$  als eine Reihe in  $g_0$  mit Eins als führendem Term schreiben:

$$Z_A = 1 + Z_A^{(1)} g_0^2 + \dots \quad (4.1.6)$$

Nun können wir eine renormierte Quarkmasse definieren als

$$\overline{m}^{PCAC} = \frac{Z_A}{Z_P} m. \quad (4.1.7)$$

Die Renormierungskonstante  $Z_A$  ist dabei wie wir gesehen haben nur auf dem Gitter zu berücksichtigen.  $Z_P$  ist allerdings auch im Kontinuum ungleich Eins. Wir sehen, dass die Quarkmasse also eine Renormierung erfahren muss, wenn sie eine Sinnvolle Bedeutung haben soll. Die Relation (4.1.7) wird später in etwas anderer Form eine große Rolle spielen.

## 4.2. Massenunabhängige Renormierung

Die QCD ist eine Theorie, die bei  $N_f$  Quarkgenerationen von  $N_f + 1$  Parametern abhängt, von den Massen  $m_s$  der Quarks und der Kopplungskonstante  $g_0$ . Um mit Hilfe der Theorie Vorhersagen treffen zu können, muss diese zunächst regularisiert werden. Die Parameter werden bei der Definition der Theorie also als nackte Größen betrachtet. Nachdem die Regularisierung wieder entfernt wurde, definiert man renormierte Parameter  $\overline{m}_s$  und  $\overline{g}$ , die zu einer festen Energieskala  $\mu$  gehören. Wir nehmen an, dass die Normierungsbedingungen, die zur Definition von  $\overline{m}_s$  und  $\overline{g}$  angewendet werden, unabhängig von den Quarkflavors sind. Dies ist keine besonders starke Forderung, beim wohlbekannten  $\overline{\text{MS}}$ -Renormierungsschema ist dies zum Beispiel der Fall. Die Evolution der renormierten Parameter ist dann lediglich eine Funktion der betrachteten Energieskala  $\mu$ , sodass man schreiben kann

$$\mu \frac{\partial \overline{g}_0}{\partial \mu} = \beta(\overline{g}_0), \quad (4.2.1)$$

$$\mu \frac{\partial \overline{m}_s}{\partial \mu} = \tau(\overline{g}_0) \overline{m}_s, \quad s = 1, \dots, N_f. \quad (4.2.2)$$

Diese Gleichungen werden Renormierungsgruppengleichungen genannt. Die Funktionen  $\beta$  und  $\tau$  haben die folgende störungstheoretische Entwicklung:

$$\beta(\overline{g}_0) \xrightarrow{\overline{g}_0 \rightarrow 0} -\overline{g}_0^3 \left\{ b_0 + b_1 \overline{g}_0^2 + b_2 \overline{g}_0^4 + \dots \right\}, \quad (4.2.3)$$

$$\tau(\overline{g}_0) \xrightarrow{\overline{g}_0 \rightarrow 0} -\overline{g}_0^3 \left\{ d_0 + d_1 \overline{g}_0^2 + d_2 \overline{g}_0^4 + \dots \right\}. \quad (4.2.4)$$

Die Koeffizienten  $b_0$ ,  $b_1$  und  $d_0$  sind bekannt und unabhängig vom Renormierungsschema. Auch wenn ihre genauen Werte im Folgenden keine große Rolle spielen werden, seien sie der Vollständigkeit halber angegeben:

$$b_0 = (4\pi)^{-2} \left(11 - \frac{2}{3}N_f\right), \quad b_1 = (4\pi)^{-4} \left(102 - \frac{38}{3}N_f\right), \quad (4.2.5)$$

$$d_0 = \frac{1}{2}\pi^{-2}. \quad (4.2.6)$$

Die höheren Koeffizienten sind abhängig vom gewählten Renormierungsschema. Bei der Lösung der Gleichungen (4.2.3) und (4.2.4) treten zwei Integrationskonstanten auf. Diese bezeichnet man als die renormierungsgruppeninvarianten Parameter  $\Lambda$  und  $M$ ,

$$\Lambda = \mu (b_0 \bar{g}_0^2)^{-b_2/b_0^2} e^{-1/2b_0 \bar{g}_0^2} \times \exp \left( - \int_0^{\bar{g}_0} dg_0 \left[ \frac{1}{\beta(g_0)} + \frac{1}{b_0 g_0^3} - \frac{b_1}{b_0^2 g_0} \right] \right), \quad (4.2.7)$$

$$M_s = \bar{m}_s (2b_0 \bar{g}_0^2)^{-d_0/2b_0} \times \exp \left( - \int_0^{\bar{g}_0} dg_0 \left[ \frac{\tau(g_0)}{\beta(g_0)} - \frac{d_0}{b_0 g_0} \right] \right), \quad (4.2.8)$$

die in eindeutigem Zusammenhang zu den renormierten Größen  $\bar{g}_0$  und  $\bar{m}_s$  stehen. Allerdings sind die RGI-Parameter unabhängig von der betrachteten Energieskala  $\mu$ . Daher sieht man schnell aus Gleichung (4.2.8), dass die Verhältnisse der renormierten Quarkmassen  $\bar{m}_s/\bar{m}_s'$  ebenfalls unabhängig von  $\mu$  sind.

Es lässt sich zeigen, dass  $M$  unabhängig vom gewählten Renormierungsschema ist, während  $\Lambda$  sehr wohl von diesem abhängt.



# 5. Das Schrödingerfunktional

In den letzten Kapiteln hatten wir es mit Fragestellungen zu tun, die ein endliches Volumen oder eine Renormierungsskala  $\mu$  involvieren. Zur Betrachtung eben solcher hat sich das Schrödingerfunktional als ein sehr geeignetes Werkzeug erwiesen, dessen wir uns in dieser Arbeit oftmals bedienen werden. Wir werden zunächst einen Überblick über dieses Schema und seine quantenmechanische Interpretation geben. Danach werden wir uns im nächsten Kapitel mit der Formulierung des Schrödingerfunktionalen auf einem Raumzeitgitter befassen. Hierbei setzten wir einige Grundkenntnisse über die Formulierung der QCD auf einem Raumzeitgitter voraus. Details hierzu lassen sich zum Beispiel in [17] finden.

Das Schrödingerfunktional wurde zunächst von Symanzik in [23] zum Beweis der Existenz des Schrödinger-Bildes in der renormierbaren Quantenfeldtheorie verwendet. Später benutzten Lüscher, Narayanan, Weisz und Wolff in [14] es in der reinen  $SU(2)$  Yang-Mills-Theorie zur Bestimmung der Skalenabhängigkeit der renormierten Kopplung. Sint veröffentlichte dann in [20] die Formulierung der QCD im Formalismus des Schrödingerfunktionalen. Wir werden uns in den folgenden Ausführungen an [14] und [20] halten.

## 5.1. Vorbereitungen

Wir betrachten QCD, die Theorie der starken Wechselwirkung, auf einer kompakten vierdimensionalen euklidischen Raumzeit. Die räumlichen Dimensionen werden als eine drei-Sphäre mit Länge  $L$  definiert, die zeitliche Dimension habe die Ausdehnung  $T$ . Dies ist in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt. Auf dieser Raumzeit werden  $SU(3)$ -Eichfelder  $A_\mu(x)$  definiert. Diese sind natürlich in Raumrichtung periodisch, da ihre Definitionsmenge periodisch ist. Um die Invarianz unter Eichtransformationen

$$A_k(x) \rightarrow A_k^\Lambda(x) = \Lambda(x) A_k(x) \Lambda(x)^{-1} + \Lambda(x) \partial_k \Lambda(x)^{-1} \quad (5.1.1)$$

sicherzustellen, dürfen wir nur solche Eichtransformationen zulassen, die ebenfalls periodisch sind, d.h. wir müssen

$$\Lambda(x + L\hat{k}) = \Lambda(x) \quad (5.1.2)$$

für alle Eichtransformationen  $\Lambda$  fordern.  $\hat{k}$  steht für den Einheitsvektor in (räumliche)  $k$ -Richtung. In Zeitrichtung fordern wir Dirichlet-Randbedingungen. Seien

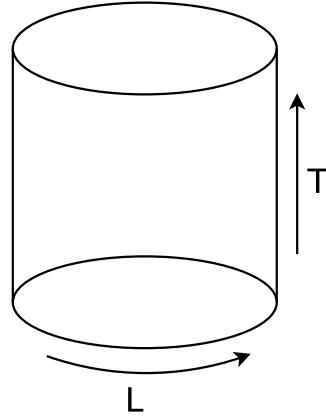


Abbildung 5.1.: Die Raumzeit des Schrödingerfunktionalformalismus.

$C$  und  $C'$  vorgegebene Eichpotentiale, so sei

$$A_k(x) = \begin{cases} C_k^\Lambda(\mathbf{x}), & x_0 = 0 \\ C'_k(\mathbf{x}), & x_0 = T. \end{cases} \quad (5.1.3)$$

Die Definition der Randbedingungen für Quarkfelder  $\psi$  erfordert etwas Sorgfalt. Der Diracoperator ist ein Differentialoperator erster Stufe. Damit besitzt er eine eindeutige Lösung, wenn die Hälfte der Komponenten der Fermionfelder auf dem Rand der Raumzeit festgelegt sind. Wir setzen also

$$\frac{P_+ \psi}{\bar{\psi} P_-} \Big|_{x_0=0} \rho, \quad \frac{P_+ \psi}{\bar{\psi} P_-} \Big|_{x_0=L} \rho', \quad \bar{\psi} P_- \Big|_{x_0=0} = \bar{\rho}, \quad \bar{\psi} P_- \Big|_{x_0=L} = \bar{\rho}', \quad P_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_0). \quad (5.1.4)$$

## 5.2. Definition

Wir werden zunächst das Schrödingerfunktional als reine Eichtheorie formulieren und eine quantenmechanische Interpretation geben. Die Verallgemeinerung unter Hinzunahme von Fermionfeldern erfolgt am Ende des Abschnitts.

Mit obigen Konventionen definiert man das Schrödingerfunktional als die Zu-

standssumme

$$\mathcal{Z}[C', C] := \int \mathcal{D}[\Lambda] \mathcal{D}[A] e^{-S_G[A]}, \quad (5.2.1)$$

$$S_G[A] = -\frac{1}{16g_0^2} \int d^4x \operatorname{tr}\{F_{\mu\mu}F_{\mu\nu}\}, \quad (5.2.2)$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + [A_\mu, A_\nu]$$

$$\mathcal{D}[A] = \prod_{x,\mu,a} dA_\mu^a(x),$$

$$\mathcal{D}[\Lambda] = \prod_x d\Lambda(x).$$

Hierbei versteht sich  $d\Lambda(x)$  als das Haar-Maß auf  $SU(3)$ . Die Integration über  $\Lambda$  stellt die Eichinvarianz des Schrödingerfunktionalen bezüglich der Randfelder  $C$  und  $C'$  sicher.

### 5.3. Interpretation

Wir wollen uns nun der quantenmechanischen Interpretation des Schrödingerfunktionalen zuwenden. Man kann  $\mathcal{Z}$  als quantenmechanische Übergangsamplitude vom Zustand  $|C\rangle$  zum Zustand  $|C'\rangle$  in der euklidischen Zeit  $T$  auffassen. Die Zustände des korrespondierenden Hilbertraums sind Wellenfunktionale  $\phi$  auf den räumlichen Komponenten der Eichfelder  $A_k(\vec{x})$ . Ein Skalarprodukt ist gegeben durch

$$\langle \phi | \chi \rangle = \int \mathcal{D}[A] \phi^*[A] \chi[A], \quad \mathcal{D}[A] = \prod_{\vec{x}, k, a} dA_k^a(\vec{x}). \quad (5.3.1)$$

Hiermit lassen sich zu den Randfeldern  $C$  und  $C'$  die zugehörigen Zustände definieren über

$$\langle C | \phi \rangle = \phi[C] \quad \forall \text{ Zustände } \phi. \quad (5.3.2)$$

Man muss noch fordern, dass alle *physikalischen* Zustände invariant unter Eichtransformationen sind. Die Menge der physikalischen Zustände wird also über die zusätzliche Forderung

$$\phi[A] = \phi[A^\Lambda] \quad \forall \text{ Eichtransformationen } \Lambda \quad (5.3.3)$$

definiert. Man findet also leicht den Projektor in den Raum der physikalischen Zustände als

$$\mathbb{P}\phi[A] = \int \mathcal{D}[\Lambda] \phi[A^\Lambda]. \quad (5.3.4)$$

Definiert man nun noch die kanonisch konjugierten Felder  $E_k^a(\vec{x})$  zu  $A_k^a(\vec{x})$  durch die Funktionalableitung  $E_k^a(\vec{x}) = \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta A_k^a(\vec{x})}$ , so findet sich der Hamiltonoperator wie gewohnt als

$$\mathbb{H} = \int_0^L d^3x \left( \frac{g_0^2}{2} E_k^a(\vec{x}) E_k^a(\vec{x}) + \frac{1}{4g_0^2} F_{kl}^a(\vec{x}) F_{kl}^a(\vec{x}) \right). \quad (5.3.5)$$

Mit diesen Vorbereitungen kann man nun  $\mathcal{Z}$  schreiben als

$$\mathcal{Z}[C', C] = \langle C' | e^{-\mathbb{H}T} \mathbb{P} | C \rangle. \quad (5.3.6)$$

Man erkennt, dass  $\mathcal{Z}$  durch die Anwendung des Projektors eichinvariant wird. Weiter sollte festgestellt werden, dass die Definitionen (5.3.6) und (5.2.1) des Schrödingerfunktionalen sich um einen von den Randfeldern  $C$  und  $C'$  unabhängigen Faktor unterscheiden. Da wir uns in unseren Untersuchungen nur für die Feldabhängigkeit von  $\mathcal{Z}$  interessieren, ist dieser aber nicht weiter von Interesse. Die Herkunft dieses Faktors wird sich im Folgenden erklären.

Man wird bei Betrachtung von Gleichung (5.3.6) die Frage stellen, weshalb in der Hamiltonschen Formulierung die Zeitkomponente der Eichfelder wegfällt, während sie in der Pfadintegralformulierung, Gleichung (5.2.1) noch vorhanden ist. Der Grund hierfür liegt in der Eichinvarianz des Schrödingerfunktionalen. Be merken wir zuerst, dass sowohl das Pfadintegral (5.2.1) als auch die Randbedingung (5.1.3) invariant unter Eichtransformationen der Form

$$A_\mu \rightarrow \Omega(x) A_\mu(x) \Omega(x)^{-1} + \Omega(x) \partial_\mu \Omega(x)^{-1}, \quad (5.3.7)$$

$$\Lambda(\vec{x}) \rightarrow \Omega(x)|_{x^0=0} \Lambda(\vec{x}) \quad (5.3.8)$$

sind, falls die Eichfunktion  $\Omega$  die Bedingung  $\Omega(x) = 1|_{x^0=T}$  erfüllt. Beim Übergang zur quantenmechanischen Interpretation muss man nun eine Eichfixierung vornehmen. Hierzu eignet sich die temporale Eichung  $A_0 = 0$ . Die zugehörige Fadev-Popov-Determinante ist feldunabhängig und hierher röhrt der Faktor, um den sich Pfadintegral- und quantenmechanische Darstellung unterscheiden. Man kann also die Zeitkomponenten des Eichfeldes ignorieren und erhält so die Verbindung zwischen den Definitionen.

Die Eichinvarianz des Pfadintegrals (5.2.1) kann noch ausgenutzt werden, um diese Darstellung weiter zu vereinfachen. Es ist bekannt, dass die Eichfelder auf einer kompakten Raumzeit wie der oben beschriebenen stets in topologisch nicht zusammenhängende Klassen zerfallen. Diese werden durch die Windungszahl  $n$  der Eichtransformationen, definiert als

$$n = \frac{1}{24\pi^2} \int_0^L d^3x \epsilon_{klj} \text{tr} \{ (A \partial_k A^{-1})(A \partial_l A^{-1})(A \partial_j A^{-1}) \}, \quad (5.3.9)$$

festgelegt. Zwei Eichfelder in der gleichen topologischen Klasse sind stets durch eine Eichtransformation  $\Omega$  wie oben definiert verbunden. Damit ist klar, dass das Integral

$$\int \mathcal{D}[A] e^{-S[A]} A_k(x) = \begin{cases} C_k^\Lambda(x) & \text{bei } x^0 = 0 \\ C'_k(x) & \text{bei } x^0 = T \end{cases} \quad (5.3.10)$$

aufgrund der Eichinvarianz tatsächlich nur von der Windungszahl  $n$  der Eichtransformation  $\Lambda$  abhängt. Hiermit kann die  $\Lambda$ -Integration in (5.2.1) durch eine unendliche Summe über topologische Klassen vereinfacht werden. Wir erhalten

$$\mathcal{Z}[C', C] = \sum_{n=0}^{\infty} \int \mathcal{D}[A] e^{-S[A]}, \quad (5.3.11)$$

wobei die Randbedingungen nun

$$A_k(x) = \begin{cases} C_k^{\Lambda_n}(x) & \text{bei } x^0 = 0 \\ C'_k(x) & \text{bei } x^0 = T \end{cases} \quad (5.3.12)$$

lauten. Hierbei ist  $\Lambda_n$  ein Repräsentant der Klasse der Eichtransformationen mit Windungszahl  $n$ . Damit hat man nun eine kompakte Formulierung des Schrödingerfunkitonals gefunden.

### Hintergrundfelder

Für kleine Kopplungen  $g_0$  wird das Funktionalintegral dominiert durch Felder in der Nähe des globalen Minimums der Wirkung. A priori wäre es möglich, dass es entartete, nichtäquivalente Minima in verschiedenen topologischen Klassen gäbe. Wir wollen dies kurz besprechen. Die Wirkung (5.2.2) ist nach [1] beschränkt durch

$$S[A] \geq \frac{8\pi^2}{g_0^2} |Q[A]|, \quad (5.3.13)$$

wobei  $Q$  die topologische Ladung, durch

$$Q[A] = -\frac{1}{16\pi^2} \int d^4x \operatorname{tr}\{F_{\mu\nu}^* F_{\mu\nu}\} \quad (5.3.14)$$

definiert, ist.  $F_{\mu\nu}^* = \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu\sigma\rho}F_{\sigma\rho}$  bezeichnet den zu  $F_{\mu\nu}$  dualen Feldtensor. Nun lässt sich die topologische Ladung mit Hilfe der Chern-Simons Wirkung der Randfelder

$$S_{CS}[C] = -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3x \epsilon_{\nu\rho\sigma} \operatorname{tr} \left\{ A_\nu \partial_\rho A_\sigma + \frac{2}{3} A_\nu A_\rho A_\sigma \right\} \quad (5.3.15)$$

schreiben als

$$Q[A] = S_{CS}[C'] - S_{CS}[C] - n, \quad (5.3.16)$$

hier ist  $n$  gerade die Windungszahl von  $A$ . Man erhält also für die Wirkung die Schranke

$$S[A] \geq \frac{8\pi^2}{g_0^2} |S_{CS}[C'] - S_{CS}[C] - n|. \quad (5.3.17)$$

Dies bedeutet aber, dass man tatsächlich nur wenige topologische Bereiche nach Konfigurationen minimaler Wirkung durchsuchen muss. Im Folgenden wird es zur Definition skalenabhängiger Größen häufig nötig sein, ein konkretes Hintergrundfeld, also eine Eichkonfiguration  $B$  minimaler Wirkung anzugeben. In der Regel ist das Auffinden einer solchen ein schwieriges Unterfangen. Die Aufgabe wird allerdings leicht, wenn man eine bekannte Lösung  $B$  der Feldgleichungen hennimmt und diese zur Definition der Randfelder  $C$  und  $C'$  verwendet, indem man

$$C_k(\vec{x}) = B_k(x)|_{x^0=0} \quad C'_k(\vec{x}) = B_k(x)|_{x^0=T} \quad (5.3.18)$$

setzt. Dies wirft natürlich die Frage auf, ob  $B$  tatsächlich das Feld minimaler Wirkung ist. In der Tat ist diese aber einfach beantwortet, wenn man einige Zusatzbedingungen an das Hintergrundfeld stellt. Natürlich ist die Schranke (5.3.13) trivial erfüllt, falls der Feldtensor

$$G_{\mu\nu} = \partial_\mu B_\nu - \partial_\nu B_\mu + [B_\mu, B_\nu] \quad (5.3.19)$$

hermitesch ist und die Abschätzung

$$S_{CS}[C'] - S_{CS}[C] < \frac{1}{2} \quad (5.3.20)$$

gültig ist. In diesem Falle gilt nämlich für die Wirkungen aller Felder  $A$  im  $n = 0$ -Sektor die Abschätzung

$$S[A] \geq S[B] = \frac{8\pi^2}{g_0^2} \{S_{CS}[C'] - S_{CS}[C]\}. \quad (5.3.21)$$

Für die übrigen Sektoren ist diese Abschätzung aber ebenfalls richtig, wie man an Gleichung (5.3.17) und (5.3.21) zusammen mit der Abschätzung (5.3.20) erkennt. Man bemerkt weiter, dass die oben beschriebene Eichkonfiguration  $B$  auch (bis auf Eichtransformationen) die eindeutige minimale Konfiguration ist. Man sieht dies, wenn man bedenkt, dass die Hermitizitätsbedingung für den Feldstärketensor erster Ordnung in der Ableitung von  $B$  ist. Hätten wir nun ein zweites Feld, dessen Feldstärketensor hermitesch ist und die Randbedingungen erfüllt, müsste dieses Feld aufgrund der Eindeutigkeit der Lösung einer Differentialgleichung erster Ordnung mit Randbedingungen durch eine Eichtransformation aus  $B$  hervorgehen.

## 5.4. Quarks

Um nun die QCD zu betrachten, müssen die Quarkfelder in die Definition des Schrödingerfunktionalen aufgenommen werden. Setzen wir bei der quantenmechanischen Interpretation (5.3.6) an, so stellen wir fest, dass die Randbedingungen (5.1.4) zu einer analogen Darstellung mit Fermionfeldern  $\rho$  und  $\rho'$  führen.

Die korrespondierende Pfadintegraldarstellung lautet

$$\mathcal{Z}[C', \bar{\rho}', \rho'; C, \bar{\rho}, \rho] = \int \mathcal{D}[A] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\bar{\psi}] e^{S[A, \bar{\psi}, \psi]}. \quad (5.4.1)$$

Die Felder müssen hierbei die Randbedingungen (5.1.4) und (5.3.12) erfüllen. Die Wirkung  $S$  setzt sich aus einem fermionischen Teil  $S_F$  und einem Eichanteil  $S_G$  wie in (5.2.2) zusammen. Es gilt

$$S[A, \bar{\psi}, \psi] = S_G[A] + S_F[A, \bar{\psi}, \psi] \quad (5.4.2)$$

$$S_F[A, \bar{\psi}, \psi] = \int d^4x \bar{\psi}(x) [\gamma_\mu D_\mu + m] \psi(x) \quad (5.4.3)$$

$$= - \int d^3\vec{x} [\bar{\psi}(x) P_- \psi(x)]_{x_0=0} - \int d^3\vec{x} [\bar{\psi}(x) P_+ \psi(x)]_{x_0=L} \quad (5.4.4)$$

Wir verwenden hierbei euklidsche  $\gamma$ -Matrizen,  $D_\mu$  versteht sich als kovariante Ableitung, definiert als

$$D_\mu \psi(x) = \partial_\mu \psi(x) + A_\mu(x) \psi(x). \quad (5.4.5)$$

## 5.5. Renormierungseigenschaften

Schließlich sind noch einige Bemerkungen zu den Renormierungseigenschaften des Schrödingerfunktionalen nötig. Entwickelt man  $\mathcal{Z}$  im perturbativen Regime um das Hintergrundfeld, erhält man für die effektive Wirkung  $\Gamma[B] = -\ln \mathcal{Z}[C', C]$  die Darstellung

$$\Gamma[B] = -g_0^{-2} \Gamma_0[B] + \Gamma_1[B] + g_0^2 \Gamma_2[B] + \dots \quad (5.5.1)$$

Der führende Term lautet  $\Gamma_0[B] = g_0^2 S[B]$ , während die Terme höherer Ordnung Feynmandiagramme mit zunehmender Anzahl an Schleifen darstellen. Um diesen eine wohldefinierte Bedeutung zu geben, ist eine Regularisierung nötig, die in unserem Falle eine Gitterregularisierung sein wird. Die Entwicklung (5.5.1) wird zunächst in der regularisierten, unrenormierten Theorie durchgeführt. Man rechnet also mit der unrenormierten Kopplungskonstante, dem nackten Eichfeld  $A$ , verwendet zur Aufstellung der Feynmanregeln die nackte Wirkung und stellt die Randbedingung (5.3.12) ans nackte Eichfeld.

Wir machen an dieser Stelle noch eine Bemerkung über die Eichinvarianz von  $\Gamma$  nach der Regularisierung. Die Gitterregularisierung erhält bekanntlich die Eichinvarianz. Das bedeutet, dass  $\Gamma[B]$  eichinvariant ist. Insbesondere ist  $\Gamma[B]$  also invariant unter Eichtransformationen der Form

$$B_\mu(x) \rightarrow B_\mu^\Omega(x) = \Omega(x) B_\mu(x) \Omega(x)^{-1} + \Omega(x) \partial_\mu \Omega(x)^{-1}, \quad (5.5.2)$$

wobei  $\Omega$  eine beliebige periodische Eichtransformation ist.

Beim Entfernen der Regularisierung treten in der Entwicklung von  $\Gamma$  Ultraviolettdivergenzen in jeder Ordnung von  $g_0$  auf. Symanzik zeigte im Zuge seiner Untersuchungen der  $\phi^4$ -Theorie in [23], dass hier alle Divergenzen verschwinden, wenn  $g_0$  renormiert wird und der Rand-Gegenterm

$$\int_{x^0=T} d^3x (Z_1 \phi^2 + Z_2 \phi \partial_0 \phi) + \int_{x^0=0} d^3x (Z_1 \phi^2 - Z_2 \phi \partial_0 \phi) \quad (5.5.3)$$

in die nackte Wirkung einbezogen wird. Betrachtet man diesen Term etwas genauer, macht man folgende Beobachtung: Die  $\phi^2$ -Terme haben keine Wirkung auf Propagatoren und Vertizes, sie treten nur als zusätzlicher Term in der Wirkung auf. Weiter ist  $Z_1$  linear divergent, weshalb man also schließen kann, dass die  $\phi^2$ -Terme bei einer dimensionalen Regularisierung nicht nötig sind. Die anderen Terme in (5.5.3) sind äquivalent zu einer Skalierung der Randfelder. Da man in der Regel ein festes Hintergrundfeld vorgibt, kann diese Renormierung auch implizit vorgenommen werden. In vielen Fällen wählt man die Randfelder auch Null,

womit diese Renormierung unnötig wird. Es gibt für dieses Verhalten in QCD keinen strengen Beweis, allerdings unterstreicht eine Vielzahl von Untersuchungen die Richtigkeit dieser Annahme.

Symanzik schließt aus seiner Arbeit, dass das Schrödingerfunktional einer Feldtheorie generell renormiert werden kann, indem  $g_0$  renormiert wird und Rand-Gegenterme eingeführt werden. Diese bestehen aus Polynomen in den Feldern und ihren Ableitungen am Rand und haben Dimension kleiner gleich drei.

Kehren wir nun zurück zur Yang-Mills-Theorie. Hier existieren keine solchen Polynome, die nichttrivial wären. Auch Terme proportional zur Chern-Simons-Wirkung sind ausgeschlossen, da diese ungerade Parität besitzt. Man folgert also, dass reine Yang-Mills-Theorie in der Formulierung des Schrödingerfunktionalen keine Renormierung außer der in der Kopplung  $g_0$  benötigt.

## 5.6. Die laufende Kopplung

Für spätere Überlegungen wird man eine renormierte Kopplung benötigen. Wir werden die QCD in einem endlichen Volumen der Ausdehnung  $L$  untersuchen. Es erweist sich als vorteilhaft, die Größe von  $L$  in physikalischen Einheiten durch eine renormierte Kopplung auszudrücken. Dies ist möglich, da zwischen den beiden Größen ein eindeutiger Zusammenhang besteht. Wie wir im letzten Abschnitt sehen konnten, sollte es ausreichen, wenn die nackte Kopplung  $g_0$  durch eine renormierte  $\bar{g}$  ersetzt wird. Diese soll im Folgenden definiert werden.

Zunächst benötigt man ein Hintergrundfeld  $B$ , sodass  $LB$  nur von einem dimensionslosen Parameter  $\eta$  abhängt. Ein konkretes Beispiel für solch ein Feld wird am Ende des Abschnitts behandelt. Man sieht zunächst, dass mit den Resultaten aus dem letzten Unterabschnitt die Ableitung

$$\Gamma'[B] = \frac{\partial}{\partial \eta} \Gamma[B] \quad (5.6.1)$$

endlich sein sollte, wenn die nackte Kopplung durch eine renormierte ersetzt wird. Betrachtet man nun Gleichung (5.5.1), so sieht man, dass die Größe

$$\bar{g}^2(L) = \Gamma'_0[B]/\Gamma'[B] = \frac{\Gamma'_0[B]}{\frac{\partial}{\partial \eta}(-g_0^{-2}\Gamma_0[B] + \Gamma_1[B] + \dots)} \quad (5.6.2)$$

in der Tat eine renormierte Kopplung darstellt. Der Faktor  $\Gamma'_0$  stellt lediglich sicher, dass  $\bar{g}_0$  in führender Ordnung mit  $g_0$  übereinstimmt. Die Renormierungseigenschaften von  $\Gamma'$  übertragen sich auf  $\bar{g}$ . Wenn nach Renormierung von  $g_0$  schon  $\Gamma'$  endlich ist, gilt dies sicher auch für  $\bar{g}$ .

Wir wollen nun noch ein Beispiel für eine einparametrische Familie von Hintergrundfeldern angeben. Man definiert hierzu die Randfelder als

$$C_k = \frac{i}{L} \begin{pmatrix} \phi_1 & 0 & 0 \\ 0 & \phi_2 & 0 \\ 0 & 0 & \phi_3 \end{pmatrix}, \quad C'_k = \frac{i}{L} \begin{pmatrix} \phi'_1 & 0 & 0 \\ 0 & \phi'_2 & 0 \\ 0 & 0 & \phi'_3 \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (5.6.3)$$

wobei

$$\phi_1 = \eta - \frac{\pi}{3}, \quad \phi'_1 = -\phi_1 + \frac{4\pi}{3}, \quad (5.6.4)$$

$$\phi_2 = -\frac{1}{2}\eta, \quad \phi'_2 = -\phi_3 + \frac{2\pi}{3}, \quad (5.6.5)$$

$$\phi_3 = -\frac{1}{2}\eta + \frac{\pi}{3} \quad \phi'_3 = -\phi_2 + \frac{2\pi}{3} \quad (5.6.6)$$

gelten. In diesem Falle nimmt das Hintergrundfeld die Form

$$B_0 = 0, \quad B_k = (x_0 C'_k + (L - x_0) C_k) / L, \quad k = 1, 2, 3, \quad (5.6.7)$$

an. Der Feldstärketensor hierzu ist

$$G_{0k} = \partial_0 B_k = (C'_k - C_k) / L, \quad k = 1, 2, 3, \quad (5.6.8)$$

und damit konstant. Dies ist eine mögliche Klasse von Hintergrundfeldern im Schrödingerfunktionalformalismus.



# 6. Das Schrödingerfunktional auf dem Gitter

Unser Ziel ist es, QCD in der Formulierung des Schrödingerfunktionalen mit Monte-Carlo-Verfahren zu simulieren. Hierzu muss zunächst das Schrödingerfunktional auf ein Raumzeitgitter übertragen werden. Man wählt hier ein hyperkubisches Gitter mit Gitterkonstante  $a$ . Die zeitliche und räumliche Ausdehnung der ursprünglichen euklidischen Raumzeit  $T$  und  $L$  müssen selbstverständlich ein ganzzahliges Vielfaches von  $a$  sein. Als erster Schritt sind die Eich- und Fermion- bzw. Antifermionfelder auf dem Gitter zu definieren.

## 6.1. Eichfelder

Wenden wir uns zunächst den Eichfeldern zu.  $\hat{\mu}$  bezeichne den Einheitsvektor in  $\mu$ -Richtung. Jedem Paar  $(x, x + a\hat{\mu})$  wird ein Gitter-Eichfeld oder Link  $U(x, \mu) \in \mathrm{SU}(N)$  zugeordnet. Die zeitlichen Linkvariablen  $U(x, 0)$  sind zunächst für alle Gitterpunkte  $0 \leq x^0 \leq T$  definiert, es erweist sich aber als nützlich, die Links außerhalb dieser Grenzen als  $\mathbf{1}_{\mathrm{SU}(N)}$  zu setzen. Weiter muss man für Links und Eichtransformationen auf diesen wie im Kontinuum Periodizität in den räumlichen Richtungen fordern. Eichtransformationen  $\Omega$  liegen in  $\mathrm{SU}(N)$  und wirken auf die Links wie

$$U(x, \mu) \rightarrow U^\Omega(x, \mu) = \Omega(x)U(x, \mu)\Omega(x + a\hat{\mu})^{-1}. \quad (6.1.1)$$

Um das Schrödingerfunktional auf dem Gitter zu definieren, müssen nun Randbedingungen an die Links gestellt werden. Man fordert also

$$U(x, k)|_{x^0=0} = W(\vec{x}, k), \quad U(x, k)|_{x^0=T} = W'(\vec{x}, k). \quad (6.1.2)$$

Um eine Verbindung zur Definition im Kontinuum zu erhalten, müssen die Randfelder  $W$  und  $W'$  mit  $C$  und  $C'$  in Verbindung gesetzt werden. Erinnern wir uns zunächst an die Tatsache, dass der Link  $U(x, \mu)$  nichts weiter als der Paralleltransporter von  $x + a\hat{\mu}$  entlang einer Geraden zu  $x$  ist. Man erhält also eine natürliche Relation zwischen  $W$  und  $C$ , indem man  $W$  mit dem Paralleltransporter zu  $C$  identifiziert. Man schreibt also

$$W(\vec{x}, k) = \mathcal{P} \exp \left\{ a \int_0^1 dt C_k(\vec{x} + a\hat{\vec{k}} - t\hat{\vec{k}}) \right\}. \quad (6.1.3)$$

Das Symbol  $\mathcal{P}$  für die Pfadordnung ist so zu verstehen, dass Felder mit größerem Wert für die Integrationsvariable  $t$  zuerst stehen. Ein analoger Ausdruck gilt auch

für die Randfelder  $C'$  und  $W'$ . Wir bemerken, dass diese Konstruktion kovariant unter Eichtransformationen  $C \rightarrow C^\Lambda$  ist, wie es für ein Eichfeld auf dem Gitter der Fall sein sollte. Nach Wilson [24] können wir eine Wirkung für das Eichfeld auf dem Gitter wie folgt schreiben:

$$S_G[U] = \frac{1}{g_0^2} \sum_p \omega(p) \text{tr}\{1 - U(p)\}. \quad (6.1.4)$$

Die Summationsvariable  $p$  steht für alle orientierten Plaquetten und  $U(p)$  für den Paralleltransporter um diese Plaquetten. Man kann dies noch deutlicher schreiben als

$$S_G[U] = \frac{1}{g_0^2} \sum_x \sum_{\mu, \nu=0}^3 \omega(P) \text{tr}\{1 - P_{\mu\nu}(x)\}, \quad (6.1.5)$$

mit  $P_{\mu\nu} = U(x, \mu)U(x + a\hat{\mu}, \nu)U(x + a\hat{\nu}, \mu)^{-1}U(x, \nu)^{-1}$ .  $\omega$  ist nur ein Gewichtsfaktor. Dieser wird gesetzt als

$$\omega(p) = \begin{cases} \frac{1}{2}c_s & \text{falls } p \text{ räumlich ist und bei } x_0 = 0 \text{ oder } x_0 = L \text{ liegt} \\ c_t & \text{falls } p \text{ zeitlich ist und am Rand liegt} \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (6.1.6)$$

Zur Reduktion von Gitterartefakten können  $c_s$  und  $c_t$  eingestellt werden. Die Wahl  $c_t = c_s = 1$  liefert die Standard Wilson-Wirkung. Man definiert nun das Schrödingerfunktional in der Yang-Mills-Theorie auf dem Gitter als

$$\mathcal{Z}[C', C] = \int \mathcal{D}[U] e^{S[U]}, \quad \mathcal{D}[U] = \prod_{x, \mu} dU(x, \mu). \quad (6.1.7)$$

Die Integration läuft über alle Links  $U$  mit den Randbedingungen (6.1.2).

Wir sollten bemerken, dass  $\mathcal{Z}$  als von  $C'$  und  $C$  abhängig betrachtet wird, anstatt  $\mathcal{Z}[W', W]$  zu schreiben. Der Zusammenhang (6.1.3) weist gegebenen Randfeldern  $C'$  und  $C$  eindeutig ihre Partner auf dem Gitter zu. Wenn wir Kontinuumslimits im Formalismus des Schrödingerfunktionalen auf dem Gitter betrachten, werden wir die Gitterlänge  $a$  gegen Null gehen lassen und die Kontinuumsrandfelder konstant halten.

Gegenüber der Kontinuumsformulierung (5.3.11) scheinen wir in (6.1.7) die Summation über die topologischen Klassen vergessen zu haben. Um zu sehen, weswegen diese auf dem Gitter überflüssig ist, betrachte man die folgende Eigenschaft des Funktionalintegrals (6.1.7). Wir bemerken, dass es unter beliebigen Eichtransformationen invariant sein muss, damit wir die Summation weglassen können, denn eine Eichtransformation der Randfelder im Kontinuum  $C \rightarrow C^\Lambda$  bewirkt eine Transformation der Gitterrandfelder  $W \rightarrow W^\Lambda$  bei  $x^0 = 0$ . Im Funktionalintegral kann dies durch eine Substitution  $dU \rightarrow dU^\Omega$  der Integrationsvariable kompensiert werden. Hierzu muss die Eichtransformation  $\Omega$  die Bedingung

$$\Omega(x) = \begin{cases} \Lambda(\vec{x}) & \text{bei } x^0 = 0 \\ 1 & \text{bei } x^0 = T \end{cases} \quad (6.1.8)$$

erfüllen. Da die konstante Eichtransformation 1 die Windungszahl Null hat, existiert eine solche Eichtransformation im Kontinuum nur, falls  $\Lambda$  ebenfalls Windungszahl Null hat. Der zentrale Punkt ist nun, dass es auf dem Gitter *immer* eine solche Transformation gibt, egal welche Windungszahl  $\Lambda$  hat. Somit sind die Definitionen (5.3.11) und (6.1.7) äquivalent.

### Quantenmechanische Interpretation

Eine quantenmechanische Interpretation in Analogie zu (5.3.6) kann mit Hilfe der Transfermatrix  $T_0$  gegeben werden. In der zeitlichen Eichung ( $U(x, 0) = 0 \forall x$ ) ist die Transfermatrix ein hermitescher Operator, der auf den Schrödinger-Wellenfunktionalen zu Zeit  $x^0 = 0$  wie eine Gitterversion des Zeitevolutionsoperators  $e^{-\mathbb{H}a}$  wirkt. Eine formale Definition erhält man über seine Wirkung auf einen Zustand. Man kann analog zu (5.3.2) einen Zustand  $|W\rangle$  zu einem Eichfeld einführen, sodass

$$\langle W|\phi\rangle = \phi[W] \quad \forall \phi. \quad (6.1.9)$$

Weiter muss gefordert werden, dass alle Zustände  $\phi$  invariant unter Eichtransformationen ihres Arguments sind. Der Projektor in den Raum dieser physikalischen Zustände sei wieder mit  $\mathbb{P}$  bezeichnet. Seien nun klassische Eichfelder  $U$  gegeben, sodass  $|U\rangle$  ein vollständiger Satz von Zuständen ist, d.h. die Identität sich als

$$\mathbb{1} = \int \mathcal{D}[U] |U\rangle \langle U| \quad (6.1.10)$$

schreiben lässt. Man drückt nun  $T_0$  mittels

$$T_0\phi[U] = \langle U| T_0 | \phi \rangle = \int \mathcal{D}[U'] \langle U| T_0 | U' \rangle \phi[U'] \quad (6.1.11)$$

aus, wobei der Kern des Operators  $\langle U| T_0 | U' \rangle$  gegeben ist als

$$\langle U| T_0 | U' \rangle = e^{-\Delta S}[U, 1, U']. \quad (6.1.12)$$

$\Delta S$  ist bis auf einen Vorfaktor die Wirkung zweier Gitterebenen in Abstand  $a$ .

Mit diesen Vorbereitungen können wir nun das Schrödingerfunktional in der Yang-Mills-Theorie schreiben als

$$\mathcal{Z}[C', C] = \langle C' | (T_0)^{T/a} \mathbb{P} | W \rangle. \quad (6.1.13)$$

## 6.2. Quarkfelder

Auf den Gitterpunkten seien nun die Fermion- und Antifermionfelder  $\psi$  und  $\bar{\psi}$  definiert. Diese tragen wie im Kontinuum Dirac-, Farb- und Flavorindizes. Setzt man nun der einfachen Notation halber  $\psi(x) = 0$  falls  $x^0 < 0$  oder  $x^0 > T$ , kann man die Wirkung für Fermionen schreiben als

$$S_F[U, \bar{\psi}, \psi] = a^4 \sum_x \bar{\psi}(D + m_0)\psi, \quad (6.2.1)$$

mit dem Standard Wilson-Diracoperator

$$D = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^3 \{ \gamma_\mu (\nabla_\mu^* + \nabla_\mu) - a \nabla_\mu^* \nabla_\mu \}. \quad (6.2.2)$$

Wir haben hierbei die kovariante Vorwärts- und Rückwärtsableitung

$$\nabla_\mu \psi(x) = \frac{1}{a} [U(x, \mu) \psi(x + a\hat{\mu}) - \psi(x)] \quad (6.2.3)$$

$$\nabla_\mu^* \psi(x) = \frac{1}{a} [\psi(x) - U(x - a\hat{\mu}, \mu)^{-1} \psi(x - a\hat{\mu})] \quad (6.2.4)$$

verwendet.  $m_0$  versteht sich als Diagonalmatrix im Flavorraum mit den nackten Quarkmassen der verschiedenen Flavor,  $m_0^f$  als Einträgen. Natürlich müssen die Fermionfelder als  $L$ -periodisch in den räumlichen Richtungen angenommen werden. Eine formale Definition des Schrödingerfunktionalen in voller QCD kann ebenfalls über ein Transfermatrix gegeben werden, deren Wirkung aber zunächst auf den Fermionfelder erklärt werden muss. Details hierzu sind in [20] zu finden.

Um die Periodizität der Randbedingungen zu berücksichtigen, fordern wir diese bis auf eine komplexe Phase für die Quarkfelder. Ist  $\hat{k}$  ein Einheitsvektor in die räumliche  $k$ -Richtung, so sei

$$\psi(x + \hat{k}L) = e^{i\theta} \psi(x), \quad \bar{\psi}(x + \hat{k}L) = e^{-i\theta} \bar{\psi}(x). \quad (6.2.5)$$

Der hier auftretende Phasenwinkel wird in Kapitel 7 noch eine Rolle spielen. Als weiterer freier Parameter kann er geschickt gewählt zur Reduktion von Gitterartefakten genutzt werden.

# 7. Die Bestimmung von $M_b$

In [5] sind Berechnungen zu Bestimmung der RGI-Masse des b-Quarks  $M_b$  in der nichttrivialen statischen Approximation und bis inklusive der ersten Ordnung der inversen B-Mesonenmasse  $1/m_B$  angestellt worden. Unser Ziel ist letztendlich die Verbesserung der Genauigkeit der in [5] bestimmten RGI-Masse des b-Quarks. Um zu verstehen, wo hier die Unsicherheiten liegen sei im Folgenden ein kurzer Überblick über die in [5] verwendete Strategie zur Berechnung von  $M_b$  gegeben. Die Details können dem zitierten Artikel entnommen werden. Ein längerer Unterabschnitt wird anschließend einen Überblick über die benötigten Größen geben. Hiernach setzen wir die Teile zusammen und geben die Bestimmungsgleichungen für  $M_b$  an. Die im Folgenden angegebenen Volumina werden über die Kopplung definiert. Wie wir in Abschnitt 5.6 gesehen haben, kann die renormierte Kopplung  $\bar{g}$  mit überschaubarem Aufwand in Abhängigkeit von der Ausdehnung  $L$  des Schrödingerfunktional bestimmt werden. Diese Beziehung wird in der Regel rückwärts gelesen und man definiert ein Volumen  $L$  durch die Bedingung, dass die Kopplung auf diesem einen festen Wert  $\bar{g}(L)$  annimmt.

## 7.1. Überblick über die Strategie

Wir geben zuerst einen kurzen Abriss der in [5] dargestellten Überlegungen zur Bestimmung von  $M_b$ . Man wählt ein erstes Volumen der Größe  $L_1 \approx 0.4 \text{ fm}$ . Hier kann bei Gitterabständen  $a < 1/m_b$  ein propagierendes b-Quark mit Fehler  $O(a^2)$  simuliert werden. Man berechnet nun die noch zu definierenden physikalischen Größen  $\Phi_i(L_1, M_b)$  und deren Kontinuumslimite. Diese werden dann in der im Abschnitt 3.2 beschriebenen Matching-Prozedur bei  $L/a = O(10)$  mit den entsprechenden HQET-Repräsentationen gleichgesetzt, um die korrekten HQET-Parameter bei  $a = 0.025 \text{ fm} - 0.05 \text{ fm}$  zu bestimmen.

Danach werden bei gleichem  $a$  die Observablen  $\Phi_i(L_2 = 2L_1, M_b)$  in HQET bei doppeltem Volumen bestimmt. Berechnet man die gleichen Größen erneut, nun aber wiederum bei  $L/a = O(10)$ , so kann man Dank der Kenntnis von  $\Phi(L_2 = 2L_1, M_b)$  die Parameter der HQET bei  $a = 0.05 \text{ fm} - 0.1 \text{ fm}$  bestimmen. Dies aber sind genügend große Gitterabstände, sodass in einem physikalisch großem Volumen definierte Observablen in HQET, wie zum Beispiel die B-Masse, mit wohldefiniertem und kleinem Fehler berechnet werden können.

Nachdem alle Schritte vollzogen sind kann nun  $m_B$  als Funktion der Größen  $\Phi_i(L_1, M_b)$  und damit als Funktion von  $M_b$  ausgedrückt werden. Der physikalische Wert von  $m_B$  bestimmt dann die gesuchte RGI-Masse. In [5] wird  $M_b$  bis

zur ersten Ordnung in  $1/m_B$ , also in der zweiten Ordnung der Entwicklung berechnet. Da in dieser Arbeit die Fixierung von  $M_b$  und damit eine Verbesserung des Ergebnisses in der niedrigsten Ordnung erfolgt, werden wir uns auch in der folgenden Darstellung auf diese Ordnung beschränken.

## 7.2. Benötigte Größen

Wir werden nun die Größen vorstellen, die zur Definition der  $\Phi_i$  erforderlich sind. Wenn wir uns auf die spingemittelte Quarkmasse  $M_b$  beschränken, ist in der niedrigsten Ordnung nur eine Observable  $\Phi_1$  nötig. Zum vollständigen Abgleich muss natürlich noch die Kopplung und die leichte Quarkmasse fixiert werden, worauf wir hier aber nicht eingehen werden.

Wir sind letztendlich an einer Funktion interessiert, die die B-Mesonenmasse  $m_B$  mit der RGI-Masse des b-Quarks  $M_b$  verbindet. Massen bestimmt man üblicherweise aus dem Zerfall einer entsprechenden Korelationsfunktion. Für den Fall des B-Mesons wäre eine Wahl für die gesuchte Korelationsfunktion die Zeitkomponente des Axialvektorstroms

$$A_\mu = \bar{\psi}_l \gamma_\mu \gamma_5 \psi_b. \quad (7.2.1)$$

Das Subskript  $l$  steht für die leichten Quarkflavors,  $\psi_b$  sei das mit dem schweren, in unserem Falle dem b-Quark, assoziierte Feld. Um die Masse des B-Mesons hieraus ableiten zu können, mittelt man  $A_0$  über eine Zeitscheibe und schreibt

$$C_{AA} = Z_A^2 a^3 \sum_{\vec{x}} \left\langle A_0(x) A_0^\dagger(0) \right\rangle. \quad (7.2.2)$$

Die Konstante  $Z_A$  stellt hier eine mit der Strömungsalgebra konsistente Renormierung von  $C_{AA}$  sicher. Man definiert nun die B-Mesonenmasse durch

$$m_B = - \lim_{x_0 \rightarrow \infty} \frac{\partial_0 + \partial_0^*}{2} \log C_{AA}(x_0). \quad (7.2.3)$$

Wenn man nun auf  $C_{AA}$  die  $1/m_B$ -Entwicklung<sup>1</sup> anwendet, erhält man die Zerlegung

$$m_B = m_B^{stat} + m_B^{(1)}, \quad (7.2.4)$$

wobei

$$m_B^{stat} = m_{bare}^{stat} + E_{stat}, \quad E_{stat} = - \lim_{x_0 \rightarrow \infty} \frac{\partial_0 + \partial^*}{2} \log C_{AA}^{stat}(x_0), \quad (7.2.5)$$

$$m_B^{(1)} = m_{bare}^{(1)} + \omega_{kin} E_{kin} + \omega_{spin} E_{spin}, \quad (7.2.6)$$

$$E_{kin} = - \lim_{x_0 \rightarrow \infty} \frac{\partial_0 + \partial^*}{2} \left[ C_{AA}^{kin}(x_0) / C_{AA}^{stat}(x_0) \right], \quad (7.2.7)$$

$$E_{spin} = - \lim_{x_0 \rightarrow \infty} \frac{\partial_0 + \partial^*}{2} \left[ C_{AA}^{spin}(x_0) / C_{AA}^{stat}(x_0) \right]. \quad (7.2.8)$$

---

<sup>1</sup>Die  $1/m_B$ -Entwicklungen einiger wichtiger Größen sind der Vollständigkeit halber in Anhang A angegeben.

Hier wird eine lineare Divergenz in  $E_{stat}$  durch  $m_{bare}^{stat}$  absorbiert, während  $m_{bare}^{(1)}$  eine quadratische Divergenz von  $E_{kin}$  aufnimmt. Wiederholt man die obigen Definitionen im Vektorkanal, also mit Hilfe des Vektorstroms

$$V_\mu = \bar{\psi}_l \gamma_\mu \psi_b, \quad (7.2.9)$$

kann man ebenfalls eine B-Mesonenmasse definieren, diese sei mit  $m_{B^*}$  bezeichnet. Man bildet nun die spingemittelte Mesonenmasse

$$m_B^{av} = \frac{1}{4} (m_B + 3m_{B^*}) = m_{bare} + E_{stat} + \omega_{kin} E_{kin}. \quad (7.2.10)$$

Die Unabhängigkeit dieser Masse von  $\omega_{spin}$  erkennt man unter Berücksichtigung der Spinsymmetrie der statischen Wirkung. Diese Gleichung bringt man nun noch in eine etwas andere Form, sodass sich Divergenzen der Ordnung  $1/a$  explizit wegheben und erhält in niedrigster Ordnung

$$m_B^{av} = m_B^{(0a)} + m_B^{(0b)}, \quad (7.2.11)$$

$$m_B^{(0a)} = m_{bare}^{stat} + E_{stat}^{sub}, \quad (7.2.12)$$

$$m_B^{(0b)} = E_{stat} - E_{stat}^{sub}, \quad (7.2.13)$$

$$(7.2.14)$$

Die Terme  $m_B^{(0a)}$  und  $m_B^{(0b)}$  sind hierbei endlich. Die Subtraktion  $E_{stat}^{sub}$  muss später dementsprechend definiert werden.

### Korelationsfunktionen im Schrödingerfunktional-Formalismus

Alle Rechnungen werden im Formalismus des Schrödingerfunktionalen durchgeführt. Es sind also noch einige weitere Definitionen vonnöten. Hierbei empfiehlt es sich, die betrachteten Massen mit Hilfe von Korellatoren der Randfelder zu definieren. Die Korellatoren des pseudoskalaren bzw. des Vektorkanals lauten

$$f_A(x_0, \theta) = -\frac{a^6}{2} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \langle (A_I)_0(x) \bar{\zeta}_h(\vec{y}) \gamma_5 \zeta_l(\vec{z}) \rangle, \quad (7.2.15)$$

$$k_V(x_0, \theta) = -\frac{a^6}{6} \sum_{\vec{x}, \vec{y}, k} \langle (V_I)_k(x) \bar{\zeta}_h(\vec{y}) \gamma_k \zeta_l(\vec{z}) \rangle. \quad (7.2.16)$$

Der Index  $I$  zeigt an, dass für  $A_0$  und  $V_k$   $O(a)$ -verbesserte Definitionen verwendet wurden. Diese sind in [9] zu finden.  $\zeta$  sind die dualen Felder zu den Randfeldern  $\rho$  aus Gleichung (5.1.4),  $\zeta(\vec{x}) = \frac{\delta}{\delta \bar{\rho}(\vec{x})}$  usw., während der Parameter  $\theta$  der Phasenwinkel der räumlichen Randbedingungen aus Gleichung (6.2.5) ist. Analog kann

man die Rand-Rand Korellatoren

$$f_1(\theta) = \frac{a^{12}}{2L^6} \sum_{\vec{u}, \vec{v}, \vec{y}, \vec{z}} \langle \bar{\zeta}'_l(\vec{u}) \gamma_5 \zeta'_h(\vec{y}) \bar{\zeta}_h(\vec{y}) \gamma_5 \zeta_l(\vec{z}) \rangle, \quad (7.2.17)$$

$$k_1(\theta) = \frac{a^{12}}{6L^6} \sum_{\vec{u}, \vec{v}, \vec{y}, \vec{z}, k} \langle \bar{\zeta}'_l(\vec{u}) \gamma_k \zeta'_h(\vec{y}) \bar{\zeta}_h(\vec{y}) \gamma_k \zeta_l(\vec{z}) \rangle, \quad (7.2.18)$$

definieren. Bei den Rechnungen im endlichen Volumen ist es nun von Vorteil, wenn man die Strategie auf die Rand-Rand Korellatoren  $f_1$  und  $k_1$  beschränkt, um die Parameter  $c_A^{HQET}$  und  $c_V^{HQET}$  zu vermeiden. Dies verringert die Diskretisierungsfehler, dafür wird sich allerdings der numerische Aufwand erhöhen, wie wir später sehen werden. Die Korellatoren  $f_A$  und  $f_1$  sind in Abbildung 7.1 skizziert.

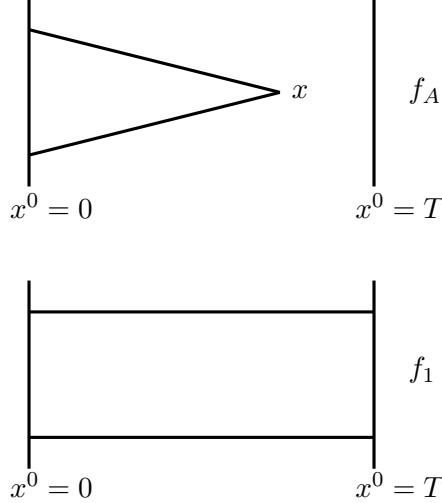


Abbildung 7.1.: Graphische Darstellung von  $f_A$  und  $f_1$ .

### Observable

Unter Verwendung der spingemittelten Größe

$$F_1(L, \theta) = \frac{1}{4} [\log f_1(\theta) + 3 \log k_1(\theta)] \quad (7.2.19)$$

definiert man nun

$$\Gamma_1(L, \theta_0) = -\frac{\partial T + \partial^* T}{2} F_1(L, \theta_0) \Big|_{T=L/2}. \quad (7.2.20)$$

Die Renormierung der Wellenfunktion am Rand fällt bei diesen Definitionen gerade heraus, weshalb  $\Gamma_1$  als renormierte Größe verstanden werden kann. Nach diesen Vorbereitungen kann man die Abgleichbedingung schreiben als

$$\Phi_1(L, M_b) = L \Gamma_1(L, \theta_1). \quad (7.2.21)$$

Man beachte, dass in [5] eine abweichende Nomenklatur verwendet wird. Die hier mit  $\Phi_1$  bezeichnete Größe trägt dort den Index 2. Da wir hier nur die niedrigste Entwicklungsordnung betrachten, benötigen wir eine Abgleichbedingung weniger.

Hier ist schon das in dieser Arbeit behandelte Problem sichtbar: Die Größe  $\Phi_1$ , die zur Fixierung des Massenparameters verwendet wird, ist durch die RGI Quarkmasse des b-Quarks  $M_b$  parametrisiert. Damit muss jede Ungenauigkeit in  $M_b$  auf  $\Phi_1$  geschlagen werden. Unser Ziel wird es sein, die Genauigkeit von  $M_b$  im Matchingvolumen zu verbessern. Aber verfolgen wir zunächst weiter die Strategie zur Massenberechnung.

Die QCD-Größe  $\Phi_1$  kann sehr einfach in der  $1/m_b$ -Entwicklung dargestellt werden. Man findet

$$\Phi_1(L, M_b) = L \left[ m_{bare} + \Gamma_1^{stat}(L, \theta_0) \right], \quad (7.2.22)$$

wobei

$$\Gamma_1^{stat}(L, \theta_0) = -\frac{\partial_T + \partial_T^*}{2} \log f_1^{stat}(\theta_0) \Big|_{T=L/2}, \quad (7.2.23)$$

verwendet wurde. Die Abhängigkeit vom Winkel  $\theta_0$  ist im Argument von  $\Phi_1$  unterdrückt. Da wir uns allerdings in unseren Überlegungen nur für die  $M_b$ -Abhängigkeit interessieren, ist dies zunächst nicht von Interesse. Details hierzu sind in [5] zu finden.

Es mag ins Auge stechen, dass in (7.2.23) die Ableitung nach der Zeitausdehnung  $T$  des Gitters vorkommt. Dies ist in der Tat numerisch aufwendig, da hierfür zumindest zwei Simulationen durchgeführt werden müssen. Der Grund für dieses Vorgehen ist ein rein technischer. Wie schon erwähnt benötigt man eine Größe der Dimension  $m_B$ . Diese erhält man aus einer logarithmischen Ableitung von Korelationsfunktionen der entsprechenden Ströme. Die Verwendung Schrödingerfunktionalen bietet hier die comfortable Möglichkeit durch Betrachtung von Rand-Rand-Korelationsfunktionen  $1/m_b$ -Abweichungen zu vermeiden. Die zusätzlichen Simulationen sind also gewisserweise der Preis, den man für die Vermeidung von  $c_A^{HQET}$  und  $c_V^{HQET}$  (siehe die Entwicklung (A.0.7)) zahlt, wie schon zum Ende von Abschnitt 7.2 erwähnt wurde. Im Anhang von [5] wird eine alternative Strategie vorgestellt, in der die  $T$ -Ableitung durch die Zeitableitung des Stroms  $f_A$  ersetzt wird und die dadurch günstiger in den Simulationskosten ist. Dies fällt vor allem bei den numerisch aufwändigeren Berechnungen mit zwei dynamischen Fermionen ins Gewicht.

## Die Skalierungsfunktion

Nun ist noch die Skalierungsfunktion zu definieren, die uns erlaubt, nach dem Abgleich zu großen Volumen zu gelangen. Dies ist eine einfache Aufgabe, aus der Definition von  $\Phi_1$  liest man ab

$$\Phi_1(2L, M_b) = 2\Phi_1(L, M_b) + \sigma_m(u(L)), \quad (7.2.24)$$

$$\sigma_m(u(L)) = 2L \left[ \Gamma_1^{stat}(2L, \theta_0) - \Gamma_1^{stat}(L, \theta_0) \right]. \quad (7.2.25)$$

Hier wurde die dimensionsbehaftet Größe  $L$  durch die renormierte Kopplung  $\bar{g}^2(L) = u(L)$  ersetzt, die im Schrödingerfunktional einfach und genau errechnet werden kann. Hierzu siehe zum Beispiel [16]. Daher ist  $\sigma_m$  als Kontinuumslices von Skalierungsfunktionen auf dem Gitter zu verstehen.

### 7.3. $M_b$ in niedrigster Ordnung

Schließlich hat man noch eine Formel für die spingemittelte B-Mesonenmasse  $m_B$  als Funktion von  $\Phi_1$  und damit der RGI Masse  $M_b$  anzugeben. Hierzu muss man nur die Definition (7.2.22) in Gleichung (7.2.10) einsetzen und erhält

$$Lm_B^{av} = \Phi_1(L, M_b) + L [E^{stat} - \Gamma_1^{stat}(L, \theta_0)] \quad (7.3.1)$$

Man verwendet nun schließlich die in Gleichung (7.2.25) definierte Skalierungsfunktion und bringt (7.3.1) in die Form von Gleichung (7.2.11). Man gelangt damit zu

$$L_2 m_B^{(0a)}(M_b) = \sigma_m(u_1) + 2\Phi_2(L_1, M_b), \quad (7.3.2)$$

$$L_2 m_B^{(0b)} = L_2 [E^{stat} - \Gamma_1^{stat}(L_2, \theta_0)]. \quad (7.3.3)$$

Hierbei sei

$$u_1 = \bar{g}^2(L_1), \quad L_2 = 2L_1. \quad (7.3.4)$$

Nun kann man wie in Abschnitt 7.2 angekündigt die Subtraktion  $E^{sub}$  mit Sinn füllen. Man findet

$$E_{stat}^{sub} = \Gamma_1^{stat}(L_2, \theta_0). \quad (7.3.5)$$

Gleichung (7.2.11) liefert nun auch die b-Quarkmasse  $M_b$  in niedrigster Ordnung aus der Lösung der Gleichung

$$m_B^{av} = m_B^{(0a)}(M_b^{(0)}) + m_B^{(0b)}(M_b^{(0)}). \quad (7.3.6)$$

Die Größen  $m_B^{(0a)}$  und  $m_B^{(1a)}$  sind im endlichen Volumen definiert und lassen sich so bequem auf dem Gitter berechnen. Das Ziel der Parametrisierung der B-Mesonenmasse  $m_B$  durch die RGI-Masse  $M_b$  mittels in HQET und QCD berechenbaren Größen ist somit erreicht.

## 8. Eine neue Strategie zur Fixierung der RGI-Quarkmasse

Wie in Referenz [5] erwähnt, röhrt ein großer Anteil des Fehlers auf den dort errechneten Wert für  $M_b$  von der Unsicherheit im Argument von  $\Phi_2$  her, vgl. Gleichung (5.5) in [5] bzw. Abbildung 8 in [5]. Die Fixierung von  $z = LM$  soll sicherstellen, dass man sich entlang einer Linie konstanter Physik bewegt. Die Kenntnis einiger Renormierungskonstanten erlaubt es, die RGI-Quarkmasse direkt mit den nackten Gitterparametern  $\kappa_{l,h}$  in Beziehung zu setzen.

Betrachten wir die Definition von  $z$  etwas genauer. In [5] ist die Größe  $\tilde{L}_1$  so gewählt, dass  $\bar{g}^2(\tilde{L}_1/4) = 1.8811$  gilt. Man kann  $z$  schreiben als

$$z = \tilde{L}_1 M = \tilde{L}_1 h(\tilde{L}_0) \underbrace{\frac{Z(g_0)Z_A(g_0)}{Z_P(g_0, \tilde{L}_0/a)} (1 + b_m(g_0)am_{q,h})m_{q,h}}_{\bar{m}(\mu_0)}, \quad (8.0.1)$$

mit

$$\tilde{L}_0 = \frac{\tilde{L}_1}{2}, \quad h(\tilde{L}_0) = \frac{M}{\bar{m}(\mu_0)}, \quad \mu_0 = \frac{1}{\tilde{L}_0}, \quad am_{q,h} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\kappa_c} - \frac{1}{\kappa_h} \right). \quad (8.0.2)$$

Man sieht nun, dass die Funktion  $h(\tilde{L}_0)$  sehr verschiedene Energieskalen, nämlich die RGI-Quarkmasse  $M$  als typische Hoch- und die renormierte PCAC-Masse  $\bar{m}(\mu_0)$  als Niederenergiegröße (das Volumen  $\tilde{L}_0 = \frac{1}{\mu_0}$  ist klein) verbindet. Die Strategie zur Berechnung von  $h$  besteht in der Zerlegung

$$h(\tilde{L}_0) = \frac{M}{\bar{m}(\mu_0)} = \frac{M}{\bar{m}(\tilde{L}_1/2^7)} \times \frac{\bar{m}(\tilde{L}_1/2^7)}{\bar{m}(\tilde{L}_1/2^6)} \times \dots \times \frac{\bar{m}(\tilde{L}_1/2)}{\bar{m}(\tilde{L}_0)} \quad (8.0.3)$$

$$= \frac{M}{\bar{m}(\mu_0)} \sigma_P(u)|_{\bar{g}_0^2(\tilde{L}_1/2^7)=u} \times \dots \times \sigma_P(u)|_{\bar{g}_0^2(\tilde{L}_0)=u}. \quad (8.0.4)$$

Die Skalierungsfunktionen  $\sigma_P$  lassen sich mit moderatem Aufwand in Gitterrechnungen bestimmen und die Hochenergiegröße  $M/\bar{m}(\tilde{L}_1/2^7)$  kann perturbativ errechnet werden. Die große Unsicherheit in  $z$  röhrt nun zu einem Teil von der Anwendung der Skalierungsfunktion  $\sigma_P$  her. Es wäre also eine alternative Methode zur Fixierung von  $z$  wünschenswert, die  $h$  bei einem kleineren Argument beinhaltet, sodass weniger Schritte mit  $\sigma_P$  nötig sind.

## 8.1. Die neue Strategie

Im Folgenden wollen wir eine solche Strategie vorstellen. Man verwendet ein massives Schema mit einem abweichend von (8.0.1) definierten Massenparameter. Wir werden uns ab jetzt mit  $\vec{z}$  auf den in (8.0.1) definierten und mit  $z$  auf den neuen Massenparameter, der in (8.1.3) definiert wird, beziehen. Mit Hilfe der Korelationsfunktion der pseudoskalaren Dichte von Systemen, die zwei schwere Quarkfelder enthalten,

$$f_P^{hh}(x_0) = -\frac{a^6}{2} \sum_{\vec{y}, \vec{z}} \langle P^{hh}(x) \bar{\zeta}_h(\vec{y}) \gamma_5 \zeta_h(\vec{z}) \rangle, \quad P^{hh}(x) = \bar{\psi}_h(x) \gamma_5 \psi_h(x), \quad (8.1.1)$$

definiert man die Masse

$$m_Q^{P,hh} = -\frac{\partial + \partial^*}{2} \ln \left( f_P^{hh}(x_0) \right) \Big|_{x_0=T/2, m_l=0}. \quad (8.1.2)$$

$m_Q^{P,hh}$  stellt per Definition eine renormierte Größe dar. Der dimensionslose Parameter  $z$  wird definiert durch

$$z(L) = L m_Q^{P,hh}(L). \quad (8.1.3)$$

Um weniger Schritte mit  $\sigma_P$  gehen zu müssen, werden wir zu  $z$  eine Skalierungsfunktion  $\sigma_Q$  definieren. Dabei gilt zu beachten, dass wir diese mit Gittersimulationen berechnen wollen. Daher wird die Skalierungsfunktion eine Abhängigkeit von der Gitterauflösung tragen. Wir definieren also zunächst eine diskrete Skalierungsfunktion  $\Sigma_Q(u, z, a/L)$  und errechnen  $\sigma$  als deren Kontinuumslimes,

$$\sigma_Q(u, z) = \lim_{a/L \rightarrow 0} \Sigma_Q(u, z, a/L), \quad (8.1.4)$$

$$\Sigma_Q(u, z, a/L) = \frac{m_Q^{P,hh}(2L)}{m_Q^{P,hh}(L)} \Big|_{\bar{g}^2(L)=u, L m_Q^{P,hh}(L)=z}. \quad (8.1.5)$$

Analog zu  $m_Q^{P,hh}$  in Gleichung (8.1.2) können wir unter Verwendung des Schwer-Leicht-Stroms,

$$f_P^{hl}(x_0) = -\frac{a^6}{2} \sum_{\vec{y}, \vec{z}} \langle P^{hl}(x) \bar{\zeta}_h(\vec{y}) \gamma_5 \zeta_l(\vec{z}) \rangle, \quad P^{hl}(x) = \bar{\psi}_h(x) \gamma_5 \psi_l(x), \quad (8.1.6)$$

die Schwer-Leicht-Masse  $m_Q^{P,hl}$  und den dazugehörigen dimensionslosen Massenparameter  $z'$  mit dessen Skalierungsfunktion  $\sigma'_Q$  definieren. Wir werden im Folgenden  $\sigma$  und  $z$  schreiben, behalten aber im Gedächtnis, dass wir später auch  $z'$  und  $\sigma'_Q$  betrachten wollen.

Nun gehen wir in zwei Schritten vor, um die Simulationsparameter  $(\beta, \kappa_h)$  im Matchingvolumen  $\tilde{L}_1$  mit der RGI-Masse in Verbindung zu setzen. Sei  $z_{max} =$

$\tilde{L}_1 m_Q^{P, hh}$  der zu fixierende Massenparameter im Matchingvolumen. Dieser wird nun iterativ in  $N$  Schritten mit der Skalierungsfunktion in ein  $z_{min}$  übersetzt. Danach kann dieses  $z_{min}$  in eine RGI-Masse im Volumen  $\tilde{L}_1/2^N M$  umgerechnet werden. Hierbei taucht der Faktor  $h$  mit einem kleineren Volumen im Argument auf, was den Gesamtfehler verringern wird.

### 8.1.1. Skalierung

Ausgehend von  $z_{max}$  wenden wir rekursiv die Skalierungsfunktion an. Hierbei ist zu beachten dass auch das Volumen des Schrödingerfunktionalen nachgeführt werden muss. Dieses ist durch die Kopplung  $\bar{g}^2(L)$  parametrisiert. Die zugehörige Skalierungsfunktion ist in [3] berechnet worden. Als Ausgangspunkt für die Rekursion in  $u$  dient die in [5] zur Festlegung des Matchingvolumens verwendete Bedingung  $u_1 = \bar{g}^2$ . Die Rekursionsformeln lauten damit

$$u_1 = \bar{g}^2, \quad z_1 = z_{max}, \quad (8.1.7)$$

$$u_i = \sigma(u_{i-1}) \quad z_i = 2\sigma_Q(u_{i-1}, z_{i-1})z_{i-1}, \quad i = 1, 0, \dots - N + 1 \quad (8.1.8)$$

$$z_{-N+1} = z_{min}. \quad (8.1.9)$$

Hierbei sollte die Anzahl  $N$  der Schritte so groß gewählt sein, dass sichergestellt ist, dass man mit  $\bar{g}^2(\tilde{L}_1/2^N)$  das perturbative Regime erreicht.

### 8.1.2. Umrechnung in die RGI-Quarkmasse

Nach Anwendung von  $N$  Iterationsschritten (in der Praxis erweisen sich  $N = 1$  oder  $N = 2$  Schritte als ausreichend) erhalten wir einen Wert für  $z_{min}$ . Dieser fixiert nun  $z_{max} = \tilde{L}_1 m_Q^{P, hh}(\tilde{L}_1)$  insofern, dass wir uns am selben physikalischen Punkt befinden, wenn wir für gegebene Parameter  $(L/a, \beta)$  mit  $\bar{g}^2(L) = \bar{g}^2(\tilde{L}_1/2^N)$  ein geeignetes  $\kappa_h$  finden, sodass

$$L m_Q^{P, hh}(L) = z_{min} \quad (8.1.10)$$

gilt. An diesem Punkt, d.h. bei diesen Parametern  $(L/a, \beta, \kappa_h)$  können wir dann die PCAC-Masse  $m(g_0)$  des schweren Quarkflavors mittels

$$M = \frac{M}{\bar{m}(\mu)} \frac{Z_A(g_0)}{Z_P(g_0, L/a)} (1 + [b_A - b_P](g_0) a m_{q,h}) m(g_0), \quad L = \frac{\tilde{L}_1}{2^N}, \quad \mu = \frac{1}{L} \quad (8.1.11)$$

$$= h(\tilde{L}_1/2^N) \frac{Z_A(g_0)}{Z_P(g_0, L/a)} (1 + [b_A - b_P](g_0) a m_{q,h}) m(g_0), \quad (8.1.12)$$

in die RGI-Masse umrechnen. Hier taucht die Funktion  $h$  wieder auf, allerdings nur mit dem Argument  $\tilde{L}_1/2^N$ . Es ist zu erwarten, dass durch die Vermeidung von Faktoren von  $\sigma_P$  die Größe  $h(\tilde{L}_1/2^N)$  einen kleineren Fehler aufweisen wird als  $h(\tilde{L}_0)$ .



# 9. Vorüberlegungen und Berechnung der benötigten Größen

## 9.1. Monte-Carlo-Integration

Auch wenn dem Leser sicherlich die Prinzipien der Monte-Carlo-Integration bekannt sind, seien hier einige Grundbegriffe erwähnt, sei es nur um die Nomenklatur für die folgenden Abschnitte einzuführen. Eine umfassendere Darstellung ist in [17] zu finden.

Um physikalische Vorhersagen mit Hilfe der QCD zu machen, muss ein Pfadintegral wie das in Gleichung (3.0.8) berechnet werden. Dies ist analytisch oft nicht möglich. Vielmehr muss man sich dem numerischen Verfahren der Monte-Carlo-Integration bedienen. Hierbei wird mit Hilfe eines Pseudozufallszahlengenerators am Computer eine Zufallssequenz von Feldkonfigurationen erzeugt, deren Verteilung proportional zu  $e^{-S[A, \bar{\psi}, \psi]}$  ist. In der Regel geht man von einer zufällig gewählten Anfangskonfiguration  $[A, \bar{\psi}, \psi]$  aus und definiert einen Update-Schritt, der aus einer Feldkonfiguration  $[A, \bar{\psi}, \psi]$  eine neue  $[A', \bar{\psi}', \psi']$  erzeugt. Dieser kann auch aus mehreren Einzelschritten bestehen. Man stellt nun sicher sicher, dass die Sequenz der so erzeugten Konfigurationen eine Markov-Kette darstellt, denn in diesem Fall garantiert der zentrale Grenzwertsatz, dass der Prozess gegen einen eindeutigen Fixpunkt, die Gleichgewichtsverteilung, konvergiert. Ohne uns zu sehr in Details zu verlieren soll erwähnt werden, dass die Konvergenz gegen eine Wahrscheinlichkeitsverteilung proportional zu  $e^{S[A, \bar{\psi}, \psi]}$  sichergestellt werden kann, wenn an den Update-Algorithmus eine Zusatzbedingung wie zum Beispiel die Forderung der „detailed balance“ gestellt wird. Näheres kann in [11] oder [17] nachgeschlagen werden.

Hat man nun eine Stichprobe von genügend großem Umfang mit der korrekten Wahrscheinlichkeitsverteilung erzeugt, kann das Pfadintegral durch eine entsprechende Summe über die in der Stichprobe enthaltenen Konfigurationen ersetzt und damit beliebige Observablen approximiert werden.

In der Regel sind zwei in Monte-Carlo-Zeit aufeinanderfolgende Konfigurationen stark koreliert, auch wenn zwischen ihnen mehrere Update-Schritte durchgeführt werden. Um diesen Effekt unter Kontrolle zu bringen verwirft man in der Regel eine Reihe weiterer Konfigurationen oder bedient sich einiger Tricks bei der Analyse. Wir werden später noch auf das Problem der Korelation in den Messdaten und die entsprechenden Analysemethoden zu sprechen kommen.

## 9.2. Durchgeführte Simulationen

Alle Berechnungen sollten sowohl für Null als auch zwei dynamische Fermionen durchgeführt werden. Für den Fall zweier dynamischer Fermionen,  $N_f = 2$ , sind allerdings die in [4] durchgeführten Rechnungen noch nicht beendet, weshalb hier die letzten Schritte unserer neuen Strategie nicht angewendet werden können. In beiden Fällen,  $N_f = 0$  und  $N_f = 2$ , sind Tripel von Parametern ( $\beta = 6/g_0^2, \kappa_c, L/a$ ) bekannt, die zu einer Linie konstanter Physik gehören. Das heißt, dass bei diesen Parametern die renormierte Kopplung einen festen Wert  $u$  hat und die leichte Quarkmasse verschwindet. Die Parameter sind im Falle  $N_f = 0$  in [3] und für  $N_f = 2$  in [4] zu finden. Für den letzteren Fall standen abgespeicherte Monte-Carlo-Konfigurationen zur Verfügung, sodass hier keine neuen Feldkonfigurationen erzeugt werden mussten, sondern lediglich Messungen auf vorhandenen Konfigurationen durchgeführt wurden. Die Simulationsparameter sind im Anhang C in Tabelle C.1 ( $N_f = 0$ ) und Tabelle C.9 ( $N_f = 2$ ) zusammengefasst.

Die Berechnung und Auswertung der Monte-Carlo-Simulationen geschah auf den **Ape1000**- und **ApeNEXT**-Rechnern des DESY in Zeuthen. Hierbei wurden in Gitterrechnungen die primären Observablen  $f_P(x_0), f_A(x_0), f_1$  bestimmt. Für unsere Berechnungen wurde nur  $f_P(x_0)$  benötigt, die übrigen Observablen wurden dennoch in die Simulationen einbezogen, um einige Referenzgrößen wie zum Beispiel  $Z_P$  zu Testzwecken berechnen zu können. Die weitere Ableitung der wenig rechenzeitintensiven sekundären Observablen  $m_Q^P$  und  $\Sigma_Q$  aus dem primären Größen  $f_P$  erfolgte dann an gewöhnlichen PCs in Münster. Hierzu wurden diverse C++-Programme geschrieben, die die Analyse komplett durchführen. Es wurden keine externen Bibliotheken oder ähnliches verwendet. Die Methoden zur Bestimmung eines  $\chi^2$ -Fits und zur Matrixinversion wurden der Quelle [19] entnommen.

## 9.3. Verwendete Analysemethoden

Bevor wir konkret auf die Berechnung der benötigten Größen zu sprechen kommen, wollen wir noch einige Worte über die zur Analyse verwendeten Techniken sagen. Die primären Observablen,  $f_P(x_0)$ , stammen wie erwähnt aus Monte-Carlo-Simulationen. Hierdurch sind neben statistischen Schwankungen zwei dominierende systematische Fehlerquellen zu erwarten, Thermalisierungseffekte und Korrelationen. Im Folgenden werden die angewendeten Techniken kurz vorgestellt, eine ausführlichere Beschreibung ist zum Beispiel in [17] zu finden.

### Kontrolle über Thermalisierungseffekte

Thermalisierungseffekte stammen daher, dass die Startkonfiguration in der Regel noch keine Konfiguration in der Nähe des Fixpunktes des Updateschritts ist. Es müssen zunächst einige Updates durchgeführt und verworfen werden, bis eine Stichprobe mit der korrekten Wahrscheinlichkeitsverteilung vorliegt. Die hieraus

resultierenden Fehler sind sehr leicht durch das Abschneiden der ersten Messungen zu eliminieren.

In unserem Falle wurde für die angestellten Rechnungen die Verschiebung des Mittelwerts für  $\Sigma_Q$  in Abhängigkeit der Anzahl  $N_c$  der abgeschnittenen Messungen bestimmt. Hierbei stellte es sich heraus, dass die Daten im Falle  $N_f = 0$  nahezu keine Thermalisierungseffekte zeigen. In den Simulationsprogrammen ist eine Thermalisierungsphase vorgesehen, bevor die Messung gestartet wird. Diese wurde demnach groß genug gewählt, um ungewollten Thermalisierungseffekten in den Messdaten vorzubeugen. Im Falle der für  $N_f = 2$  gespeicherten Daten waren ebenfalls keine Thermalisierungseffekte zu beobachten. Es wurden alle durchgeführten Simulationen auf Fehler durch Thermalisierungseffekte überprüft, exemplarisch sind in den Abbildungen 9.1 und 9.2 entsprechende Plots zu finden.

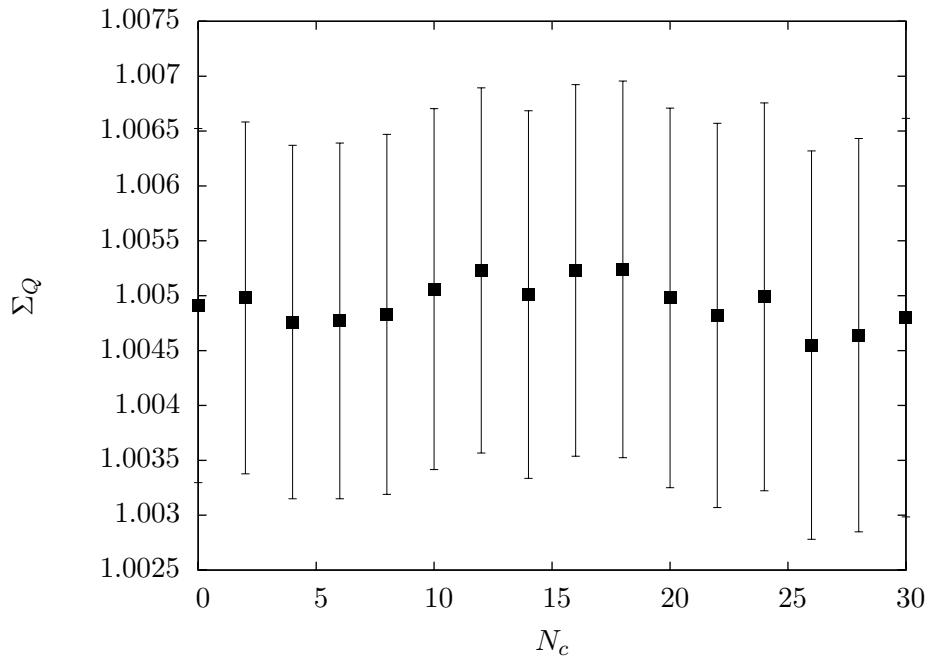


Abbildung 9.1.: Thermalisierungseffekte:  $\Sigma_Q$  gegen den Cutoff  $N_c$  bei  $N_f = 0$  für  $L/a = 16$ . Die Verschiebung der Mittelwerte ist im Vergleich zur Größe der Fehlerbalken zu vernachlässigen.

## Korelationen

Die zweite Fehlerquelle, eine etwaige Korelation in den Messwerten ist etwas schwieriger unter Kontrolle zu bringen. Diese Korelationen können in Form von Korelationen zweier Observablen und von Autokorelation auftreten. Im Idealfall sollte die Sequenz von Feldkonfigurationen aus einer Monte-Carlo-Simulation

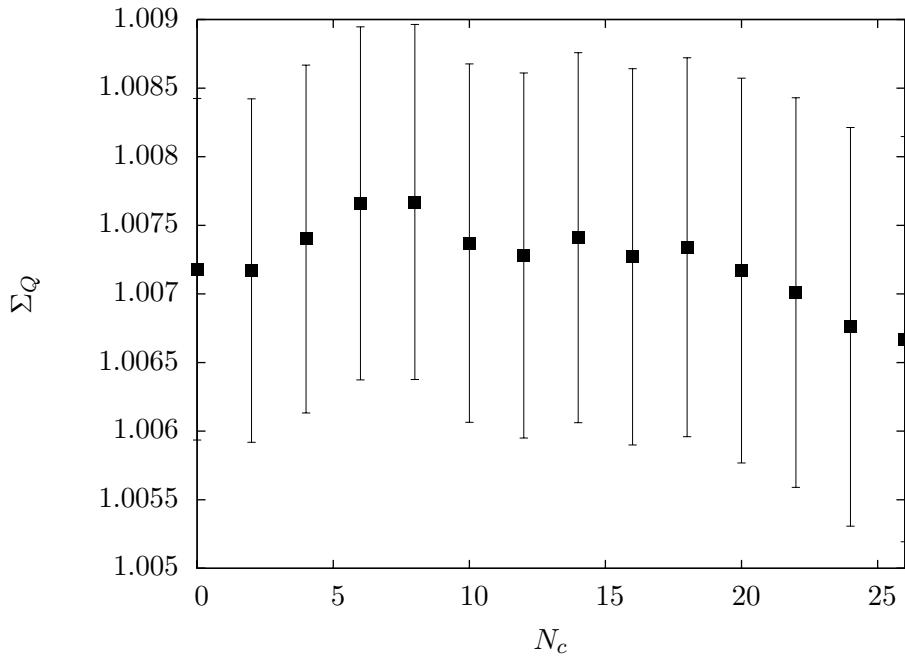


Abbildung 9.2.: Thermalisierungseffekte:  $\Sigma_Q$  gegen den Cutoff  $N_c$  bei  $N_f = 2$  für  $L/a = 8$ . Die Verschiebung der Mittelwerte ist im Vergleich zur Größe der Fehlerbalken zu vernachlässigen.

eine Trajektorie im Phasenraum darstellen, die eine Markovkette ist. Die Wahrscheinlichkeit, dass in einem Schritt eine bestimmte Konfiguration im Phasenraum angenommen wird sollte also nur vom direkten Vorgänger abhängen. In der Praxis muss hier immer ein Kompromiss eingegangen werden. Verwirft man zwischen zwei Messungen genügend erzeugte Feldkonfigurationen, so werden die resultierenden Messwerte sogar annähernd unabhängig sein. Dies kostet aber auch viel Rechenzeit. Die Kunst besteht vielmehr darin, den Punkt zu finden, an dem die Daten noch leicht koreliert sind aber mit entsprechenden Analysemethoden trotzdem eine sichere Fehlerabschätzung möglich ist. Hier ist die Ausnutzung der vorhandenen Rechenleistung maximal.

Weiter ist zu beachten, dass in der Regel verschiedene Observable mit dem gleichen Satz erzeugter Konfigurationen berechnet werden. In unserem Falle sind pro Simulation drei verschiedene Werte für  $\kappa_h$  gewählt worden, um eine Interpolation in  $z$  vornehmen zu können. Es muss hier also beachtet werden, dass die Messdaten für verschiedene  $z$  koreliert sind. Dies lässt sich nicht durch das Verwerfen von Konfigurationen vermeiden, man müsste vielmehr pro Konfiguration nur eine Observable bestimmen *und* sicherstellen, dass keine Korrelation zwischen den Konfigurationen besteht. Dies ist allerdings nicht sehr praktikabel, außerdem können die Korrelationen zwischen den Observablen mit entsprechenden Analyse-

methoden unter Kontrolle gebracht werden.

Die typischerweise verwendete Analyse besteht aus einer Kombination zweier Methoden, dem so genannten Jackknife-Resampling und einem eventuell vorgeschobenen Bining.

### Jackknife-Analyse

Die Jackknife-Methode wurde von Tukey 1956/58 vorgeschlagen und fällt in die Kategorie der Resampling-Methoden. Sei eine Stichprobe  $X_1, \dots, X_N$  einer Zufallsgröße  $X$  gegeben und eine Funktion  $y(X)$  dieser. Es ist sofort klar, dass eine Approximation wie

$$\langle y(X) \rangle \stackrel{?}{=} y(\langle X \rangle) \quad (9.3.1)$$

nicht bzw. nur im Falle einer linearen Funktion  $y$  möglich ist, da die Zufallsverteilung  $X$  eine ganz andere als die von  $y(X)$  sein kann. Aber auch ein Ansatz der Form

$$\langle y(X) \rangle = \frac{1}{N} \sum y(X_i) \quad (9.3.2)$$

birgt Gefahren, da nicht bekannt ist, wie gut die  $y(X_i)$  die tatsächlich unsere gesuchte Verteilung wiederspiegeln. Die Idee der Resampling-Methoden ist es nun, aufgrund der Daten  $X_i$  eine Stichprobe von  $y(X)$  zu erzeugen, die der tatsächlichen Verteilung möglichst gut entspricht. Bei der Jackknife-Analyse wird dies wie folgt realisiert: Ersetzen wir  $X_i$  durch das so genannte Jackknife-Sample

$$X_i^J = \frac{1}{N-1} \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N X_j, \quad (9.3.3)$$

so sei die Stichprobe für  $y(X)$  gegeben durch

$$y_i^J = y(X_i^J). \quad (9.3.4)$$

Man kann nun zeigen, dass wir mit der Schätzung

$$\langle y \rangle^J = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^J \quad (9.3.5)$$

den systematischen Fehler um einen Faktor  $1/(N-1)$  verringern. Für die Varianz des Mittelwertes wird eine modifizierte Formel verwendet. Im Prinzip ist

$$\sigma_{X,JN}^2 = \frac{(N-1)}{N} \sum_{i=1}^N (X_i^J - \langle X \rangle^J)^2, \quad (9.3.6)$$

nichts weiter als die bekannte Formel für die Standardabweichung, allerdings unter Berücksichtigung der Tatsache, dass die  $X_i^{(J)}$  schon Mittelwerte sind. Dies

geschieht durch den Faktor  $(N - 1)^2$ . Für primäre Observable wird also die Formel (9.3.6) den Standardfehler liefern. Für eine sekundäre Observable  $y(X)$  ist die Abschätzung

$$\sigma_{y,JN}^2 = \frac{(N - 1)}{N} \sum_{i=1}^N (y_i^J - \langle y \rangle^J)^2, \quad (9.3.7)$$

jedoch wesentlich robuster als die Standardabweichung, was einer der Hauptgründe für die Anwendung des Jackknife ist.

Die Jackknife-Methode gibt auch eine sichere Approximation des Fehlers im Falle einer Funktion mehrerer Zufallsgrößen. Betrachten wir die Fehlerrechnung in diesem Falle etwas genauer. Nehmen wir an, wir haben eine Funktion  $y$ , die von  $M$  Zufallsgrößen  $X^{(1)}, \dots, X^{(M)}$  abhängt. Sind nun  $N$  Stichproben jeder Zufallsgröße  $X^{(i)}$  gegeben, ist die Bildung des Mittelwerts nach Gleichung (9.3.5) klar. Es gilt

$$\langle y^J \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y(X_i^{(1)J}, \dots, X_i^{(M)J}). \quad (9.3.8)$$

Uns interessiert nun aber der Fehler dieser Abschätzung. Hängt eine Funktion von mehreren Variablen ab, ist für den Fehler auch eine eventuelle Abhängigkeit der Variablen untereinander zu beachten. Es gilt genähert

$$(\sigma_y)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^M \frac{\partial y}{\partial X^{(i)}} \text{cov}(X^{(i)}, X^{(j)}) \frac{\partial y}{\partial X^{(j)}}, \quad (9.3.9)$$

mit der Kovarianzmatrix

$$\text{cov}(X^{(i)}, X^{(j)}) = \left\langle \left( X^{(i)} - \langle X^{(i)} \rangle \right) \left( X^{(j)} - \langle X^{(j)} \rangle \right) \right\rangle. \quad (9.3.10)$$

Diese Formel ändert sich im Falle unserer Stichproben zu

$$\text{cov}(X^{(i)}, X^{(j)}) \approx \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N \left( X_k^{(i)} - \langle X^{(i)} \rangle \right) \left( X_k^{(j)} - \langle X^{(j)} \rangle \right). \quad (9.3.11)$$

Im Falle von Jackknife-Daten kann man die nichtdiagonalen Einträge der Kovarianzmatrix als Null annehmen und für den Fehler die Formel (9.3.7) mit

$$y_i^J = y(X_i^{(1)J}, \dots, X_i^{(M)J}) \quad (9.3.12)$$

verwenden. Dies führt zu einem Fehler der berechneten Varianz, der im Vergleich zu statistischen Schwankung in der Regel jedoch vernachlässigt werden kann. Diese Eigenschaft von Jackknife-Daten erweist sich als sehr nützlich. Es ist nicht sehr schwierig, nach Gleichung (9.3.11) eine Approximation der Kovarianzmatrix zu berechnen. Der Fehler dieser Näherung ist jedoch in der Regel groß. Weiter muss man oft mit Daten, die auf Gittern verschiedener Auflösungen  $L/a$  errechnet wurden, eine Extrapolation  $a/L \rightarrow 0$  ins Kontinuum vornehmen. Eine verlässliche

Abschätzung dafür, wie sich die Kovarianzmatrix im Falle einer solchen Limesbildung verhält, ist oft nicht möglich. Daher empfiehlt es sich, die Extrapolation innerhalb der Jackknife-Samples durchzuführen, danach Jackknife-Samples für abgeleitete Kontinuumsgrößen zu berechnen und erst für das Endergebnis den Mittelwert zu bilden.

### Bining

Liegt in den Messdaten Autokorelation vor, muss man vor dem Jackknife-Resampling noch eine weitere Analysemethode verwenden, um eine falsche Abschätzung des Fehlers zu vermeiden. Bevor das Jackknife-Resampling angewendet wird, generiert man aus den ursprünglichen Messdaten neue Samples, indem man über gerade so viele  $X_i$  mittelt, dass die Korrelation vernachlässigt werden kann. Beträgt die Autokorelationszeit zum Beispiel  $k/2$ , so setzen wir

$$\tilde{X}_i = \frac{1}{k} \sum_{j=ik}^{(i+1)k} X_j, \quad i = 0, \dots, N/k - 1. \quad (9.3.13)$$

Hier wurde angenommen, dass die Binlänge  $k$  ein Teiler von  $N$  ist. Dies ist natürlich nicht immer der Fall und man muss unter Umständen einige Messungen verwerfen. Die Anzahl der verbleibenden Stichproben nimmt damit ab auf

$$\tilde{N} = \lfloor N/k \rfloor. \quad (9.3.14)$$

Wir müssen nun noch die Frage beantworten, wie man denn die korrekte Binlänge bestimmen kann. Durch die Mittelung über einen Block von Messdaten verringert man die Korrelation gewiss. Allerdings muss man bedenken, dass die effektive Anzahl der Messungen  $N$  sinkt. Diese geht als Faktor  $\frac{1}{N(N-1)}$  in Formel (9.3.7) für die Varianz ein (das sieht man durch Einsetzen von (9.3.4) in (9.3.7)) und erhöht somit diese. Dieser scheinbar vergrößerte Fehler ist natürlich unter Umständen – sofern die Binlänge richtig gewählt ist – der korrekte Fehler, der ohne den Einsatz dieser Methode unterschätzt worden wäre. Wird die Binlänge allerdings zu groß gewählt ist der angegebene Fehler ebenfalls zu hoch. Da es bei unseren Untersuchungen auf die korrekte Abschätzung des Fehlers ankommt ist dies auf jeden Fall zu vermeiden.

### Bestimmung der korrekten Binlänge

Für die Bestimmung der korrekten Binlänge sind zwei Methoden gebräuchlich, die Betrachtung des Fehlers in Abhängigkeit von der Binlänge und natürlich die Berechnung der integrierten Autokorelationszeit. Die Bestimmung der korrekten Binlänge erfolgt am verlässlichsten durch Berechnung der Autokorelationszeit. Dies ist jedoch nicht immer ohne Schwierigkeiten möglich. In [25] ist eine ausführliche Diskussion zu diesem Thema wie auch eine selbstkonsistente Methode zur Bestimmung der Autokorelationszeit von Monte-Carlo-Daten zu finden.

Diese Methode wurde für die Analyse implementiert und angewendet. Es wurde für die in Gleichung (8.1.2) benötigten primären Observablen  $f_P(L/2 \pm 1)$  die Autokorelationszeit berechnet und ein entsprechendes Bining durchgeführt.

Ein weiterer Indikator für die korrekte Binlänge ist der folgende: Man bestimmt für sukzessive größer und größer gewählte Binlängen  $k_i$  die Standardabweichung nach (9.3.6) für die Größen  $\tilde{X}_j$ . Die Erwartung ist nun, dass ohne Bining (d.h. für  $k_1 = 1$ ) der Fehler bei korelierten Daten unterschätzt ist. Dies wird auch für alle  $k_i$  der Fall sein, die noch zu klein sind. Da aber mit wachsender Binlänge die Autokorelationszeit abnimmt, wird der Fehler größer werden, bis wir bei der korrekten Binlänge ankommen. Für eine genügend große Anzahl von Messdaten sollte nun der Fehler annähernd konstant bleiben, bis aufgrund der Reduzierung des Stichprobenumfangs gemäß (9.3.14) der Fehler wieder zunimmt. Die korrekte Binlänge liegt also im Bereich des beobachteten Plateaus. Diese Methode stellt ein einfaches und schnelles Mittel zur Analyse von Autokorrelationen dar und wurde zur Überprüfung der korrekten Implementierung der Methode aus [25] angewendet.

Beide Analysemethoden sind stark davon abhängig, dass eine genügend große Stichprobe vorliegt. Ein Vorteil bei der Bestimmung der integrierten Autokorelationszeit ist, dass sich hier ein Fehler angeben lässt. Allerdings ist wie in [25] erklärt wird der Fehler des Fehlers beachtlich. In den Abbildungen 9.3 und 9.4 ist exem-

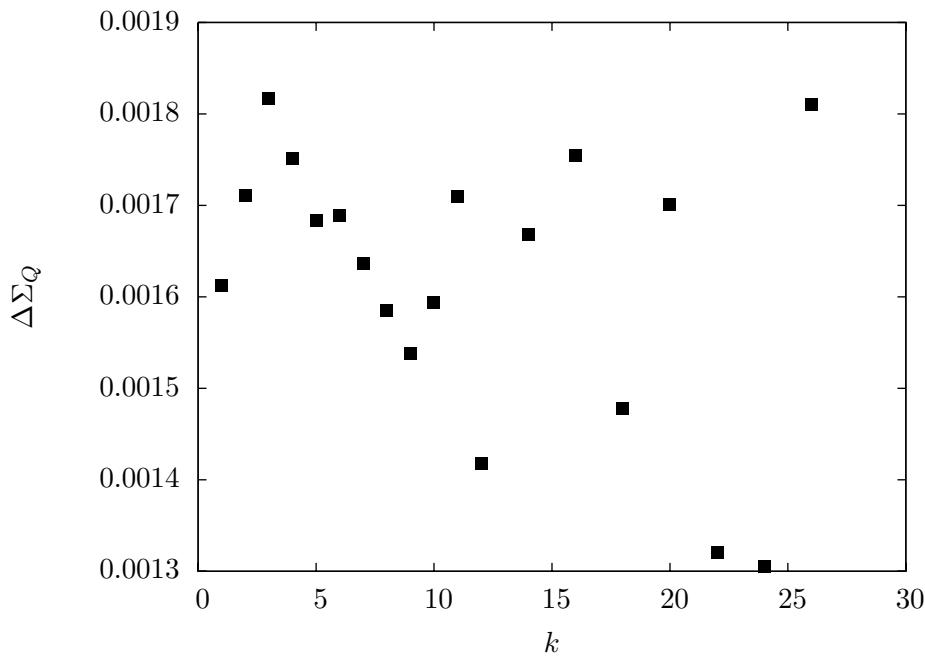


Abbildung 9.3.: Entwicklung von  $\Sigma_Q$  gegen Binlänge  $k$  für  $N_f = 0$  bei  $L/a = 16$ . Fehler und Binlänge zeigen hier keine offensichtliche Korrelation.

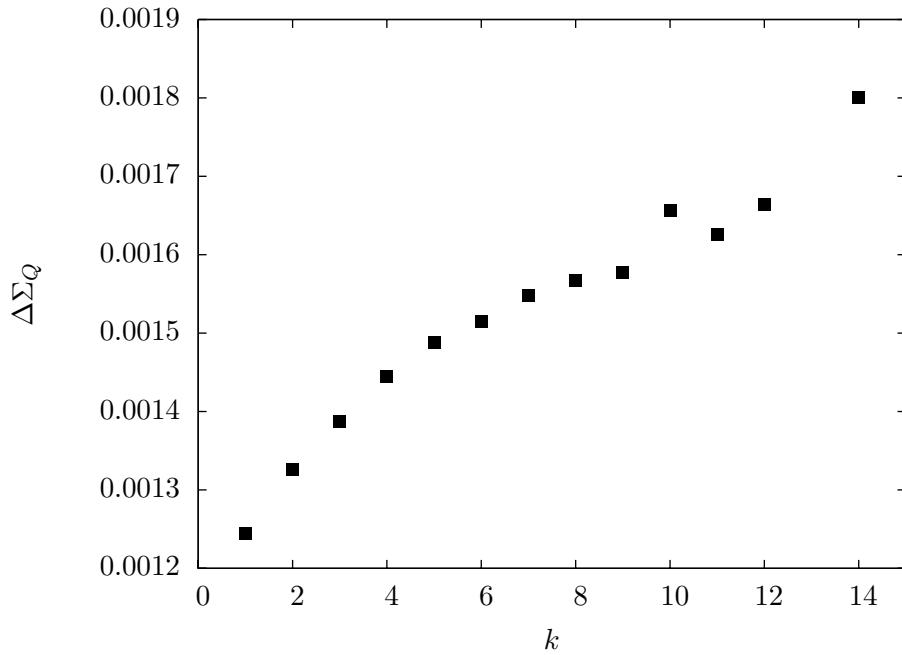


Abbildung 9.4.: Entwicklung von  $\Sigma_Q$  gegen Binlänge  $k$  für  $N_f = 2$  bei  $L/a = 8$ . Der Fehler zeigt eine eindeutige Abhängigkeit von der Binlänge.

plarisch für zwei Simulationen die Skalierungsfunktion  $\Sigma_Q$  gegen die Binlänge aufgetragen. Sie belegen die Beobachtung, dass die Rechnungen für  $N_f = 2$  bei großen Gittern (Abbildung 9.4) eindeutig Autokorelation aufweisen, während die Daten aus den Simulationen ohne dynamische Fermionen dieses Verhalten kaum zeigen. Dies resultiert unter anderem daraus, dass die Monte-Carlo-Zeit zwischen zwei Messungen im Falle der aufwändigeren Rechnungen für  $N_f = 2$  kürzer gewählt wurde.

## 9.4. Benötigte Größen

Wir werden uns nun mit der konkreten Berechnung der benötigten Größen auseinander setzen. Während die Masse  $m_Q^{P,hh}$  sich leicht aus den primären Observablen errechnen lässt, erfordert die Berechnung der Skalierungsfunktion doch einige Zwischenschritte.

### 9.4.1. Die Masse $m_Q^P$

Die Grundgröße zu Bestimmung von  $\sigma_Q$  ist die Masse  $m_Q^P$ . Die Berechnung ist nicht weiter aufwändig, da  $f_P$  von den entsprechenden Simulationsprogrammen berechnet wird, die zu Beginn der Arbeit schon vorlagen. Die Anwendung der

diskreten Ableitung in (8.1.2) stellt keine Schwierigkeit dar.

### 9.4.2. Die Skalierungsfunktion $\sigma_Q$

Die Bestimmung von  $\sigma_Q$  als Funktion von  $z$  bzw. die Überlegungen, wie diese korrekt zu bestimmen ist, stellt den Größten Anteil der Arbeit dar. Es wurden verschiedene Methoden zur Berechnung untersucht und wieder verworfen. Die Fehlerrechnung sollte so genau wie möglich durchgeführt werden, da die Unsicherheit von  $\sigma_Q$  mit denen von  $h$  und  $Z_P$  die größte Fehlerquelle ist.

Wir berechnen zunächst die diskrete Skalierungsfunktion  $\Sigma_Q$  für approximierte (d.h. mehr oder minder clever geratene) Werte von  $z$ . Hierbei fanden wir die erste Näherung für  $z$ , hier als  $\tilde{z}$  bezeichnet, aus Formel (8.0.1), während die Werte für  $u$  durch die bekannten Parameter für  $\beta$  in [3] festgelegt und mit  $\tilde{u}$  bezeichnet sind. Die Nomenklatur  $\tilde{z}$  und  $\tilde{u}$  kommt daher, dass die korrekten Werte erst aus der Rekursion (8.1.7) – (8.1.9) folgen und wir für die Simulationen eine Approximation wählen. Im Prinzip sollte die Skalierungsfunktion nicht weit von Eins abweichen, da die effektive Quarkmasse keine starke Volumenabhängigkeit zeigen sollte. Ohne weitere Überlegungen anzustellen könnte man vorschlagen, zunächst in der Rekursion  $\sigma_Q = 1$  zu setzen und dann in mehreren Simulationen den Parameter  $\kappa_h$  so lange zu tunen, bis die Rekursionsbedingung (8.1.7)-(8.1.9) erfüllt ist. Dies würde allerdings einen hohen Rechenaufwand bedeuten. Vielmehr wählen wir für die ersten Simulationen  $\tilde{z}$  genähert nach (8.0.1) und für weitere Schritte nehmen wir an, dass  $\sigma_Q \approx 1$  gilt. Dann können wir die Funktion  $\sigma_Q(z, u)$  durch ein Polynom in  $z$  beschreiben und zum exakten Wert für  $z$ , der aus der Rekursion folgt, inter- oder extrapoliieren. Da wie oben erwähnt nicht zu erwarten ist, dass  $\sigma_Q$  weit von Eins abweicht, sollte dadurch kein größerer Fehler entstehen.

Für jedes Wertepaar  $(u, \kappa_h)$  wurden Simulationen mit verschiedenen Gitterauflösungen  $L/a$  durchgeführt, um den Kontinuumslimes zu errechnen. Hierbei ist wichtig, dass in jeder Gitterauflösung das gleiche  $\tilde{z}$  betrachtet wird. Simulationen mit etwa 20 Monte-Carlo-Schritten lieferten eine erste Abschätzung. Das Ziel war nun,  $\tilde{z}$  für alle Auflösungen möglichst zur Übereinstimmung zu bringen. Hier kommt uns die Tatsache zur Hilfe, dass der Zusammenhang  $z(\kappa_h)$  in sehr guter Näherung linear ist. Als ein (willkürlich gewähltes) Beispiel sei Abbildung 9.5 angegeben. Wir konnten also durch Inversion der Funktion  $z(\kappa_h)$  für jede Auflösung  $a/L$  dasjenige  $\kappa_h$  finden, das innerhalb der Fehler zum vorher festgelegten Wert von  $\tilde{z}$  gehört. Wir berechneten zu einem festen  $\tilde{u}$  die Skalierungsfunktion  $\sigma_Q(\tilde{u}, z)$  jeweils für drei Werte von  $z = \tilde{z}^{(i)}$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Zum einen ist so gewährleistet, dass für die Festlegung der  $z_i$  durch die Rekursionsbedingung  $\sigma_Q$  wie oben beschrieben durch ein Polynom zweiten Grades genähert und entsprechend verschoben werden kann. Zum anderen kann hierdurch letztendlich im Ergebnis  $M$ , wofür am Ende dadurch auch drei Werte vorliegen, sicher zum korrekten Wert  $M_b$  der b-Quarkmasse interpoliert werden.

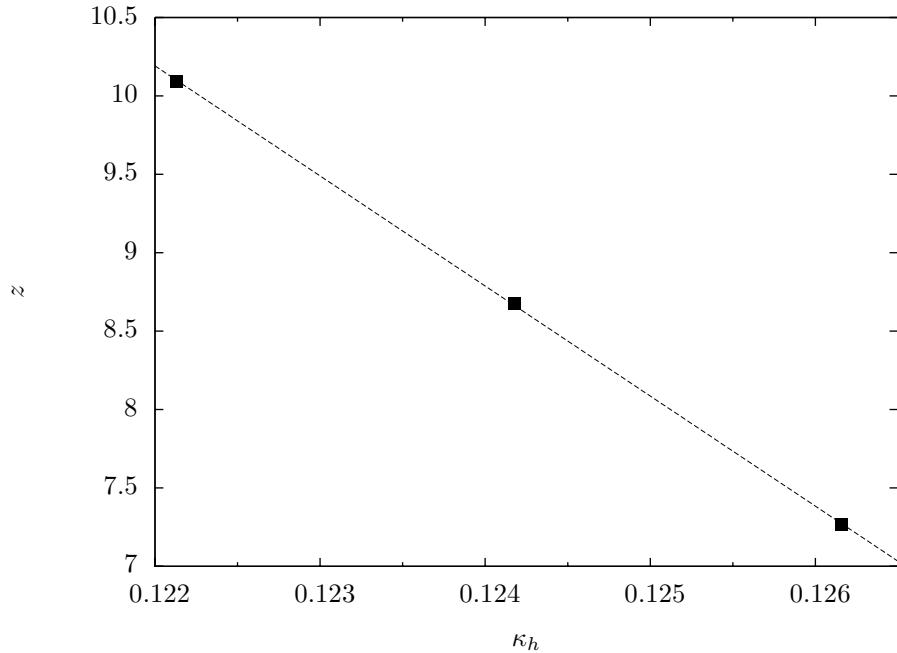


Abbildung 9.5.: Zusammenhang zwischen  $z$  und  $\kappa_h$  bei  $L/a = 12$ ,  $u = 2.4484$ .

#### 9.4.3. Kontinuumslimes

Bisher haben wir also nach einem Tuning von  $\kappa_h$  für verschiedene Gitterauflösungen  $a/L$  die diskrete Skalierungsfunktion  $\Sigma_Q(u, z, a/L)$  bei festem  $z = \tilde{z}$  und  $u = \tilde{u}$  berechnet. Nun muss noch der Kontinuumslimes gebildet werden. Da wir in  $O(a)$ -verbesserter Theorie arbeiten, können wir für die Limesbildung einen Fit der Form

$$\Sigma_Q(\tilde{u}, \tilde{z}, a/L) = a_0 + a_1(a/L)^2 \quad (9.4.1)$$

annehmen und hieraus  $\sigma_Q(\tilde{u}, \tilde{z}) = a_0$  folgern. Da bei einem herkömmlichen Fit über eine Minimierung der Fehlerquadrate die Inversion der Kovarianzmatrix schon die Fehler der Parameter  $a_i$  liefert (siehe z.B. [19]), stellt sich dieses Vorgehen als besonders bequem heraus. Die Berechnung der diskreten Skalierungsfunktion erfolgte bei  $N_f = 0$  für vier verschiedene Gitterauflösungen  $L/a$ , bei  $N_f = 2$  waren es drei. Damit ist die Lösung des  $\chi^2$ -Fits überbestimmt. Um eine sichere Extrapolation zu gewährleisten, wurden die Gitter der geringsten Auflösungen bei der Limesbildung nicht berücksichtigt. Graphen zur Kontinuumsextrapolation sind in den Abbildungen 9.6 und 9.7 zu finden.

#### 9.4.4. Bestimmung von $\Sigma_Q$

Nun haben wir noch zu erklären, wie die diskrete Skalierungsfunktion  $\Sigma_Q$  berechnet wurde. Für die wie im letzten Abschnitt beschrieben approximierten Parame-

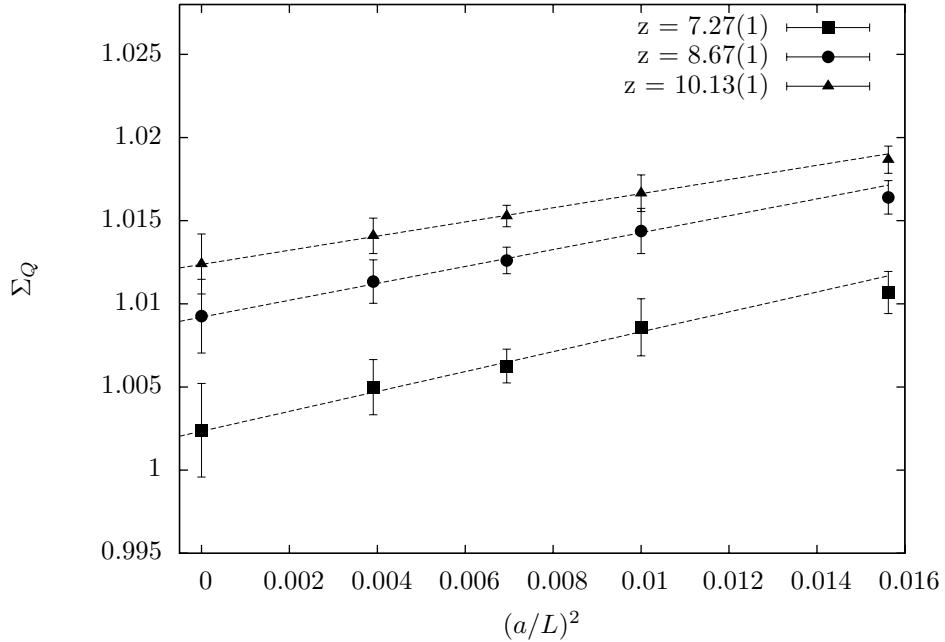


Abbildung 9.6.: Kontinuumsextrapolation der Skalierungsfunktion  $\Sigma_Q$  bei  $u = 2.4484$ .

ter  $\kappa_h$  wurde  $m_Q^{P, hh}(u, a/L)$  und  $m_Q^{P, hh}(u, a/2L)$  berechnet. Wie oben beschrieben ist es wichtig, dass zu festem  $\tilde{u}$  die  $\Sigma(\tilde{u}, \tilde{z}, a/L)$  für jede Auflösung  $a/L$  bei festem  $\tilde{z}$  berechnet werden. Dies ist durch die wie oben beschrieben durchgeführte Abschätzung von  $\kappa_h$  nicht exakt möglich. Die Idee besteht nun erneut darin, die berechneten  $\Sigma_Q$  zu den gewünschten  $\tilde{z}$  zu extrapolieren. Wir haben also zunächst die Jackknife-Samples für

$$m_Q^{P, hh}(\tilde{u}, \tilde{z}, a/2L)_i^{(J)} =: M_i^{(J)} \quad (9.4.2)$$

durch den Mittelwert

$$m := \langle m_Q^{P, hh}(\tilde{u}, \tilde{z}, a/L) \rangle \quad (9.4.3)$$

aus der zweiten Simulation geteilt. Daraus haben wir für jedes Sample (wir rufen uns in den Kopf, dass wir für jede Kopplung je drei  $\tilde{z}^i$  gewählt haben) ein Polynom

$$\frac{M_i^J}{m}(z) = a_0^{(i)} + a_1^{(i)}z + a_2^{(i)}z^2 \quad (9.4.4)$$

bestimmt. Dieses wurde dann an den gewünschten Stellen  $\tilde{z}$  ausgewertet. Der Fehler setzt sich nun aus zwei Teilen zusammen: Zum einen erhalten wir einen Jackknife-Fehler, wenn wir die Funktionswerte des Polynoms als neue Jackknife-Samples auffassen, zum anderen müssen wir berücksichtigen, dass  $m$  aus einer

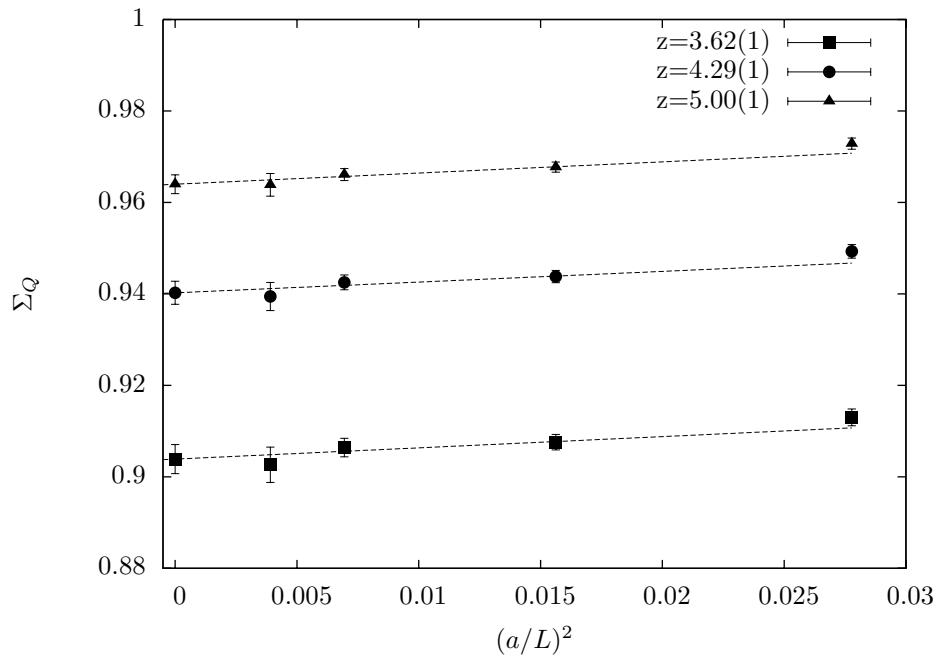


Abbildung 9.7.: Kontinuumsextrapolation der Skalierungsfunktion  $\Sigma_Q$  bei  $u = 1.8811$ .

Simulation stammt und daher auch mit einem Fehler behaftet ist. Da die Daten zu  $M$  und  $m$  aber wie oben erwähnt aus verschiedenen Monte-Carlo-Historien berechnet wurden und daher nicht koreliert sind, kann der Fehler von  $m$  nach Gauß einfach quadratisch auf den Jackknife-Fehler in  $M/m$  geschlagen werden.



# 10. Die Anwendung der neuen Strategie

Die Anwendung der neuen Strategie lässt sich in drei Teilschritte gliedern. Zunächst müssen wir den Anschluss ans alte Schema herstellen. Dazu bestimmen wir den Parameter  $z = Lm_Q^{hh}$  im Matchingvolumen von [5] mit den dort verwendeten Parametern. Auf diesen wenden wir die Skalierungsfunktion  $\sigma_Q$  zweimal an, um bei  $z(L_{min} = L_{max}/4)$  anzukommen. Im letzten Schritt berechnen wir hieraus die RGI-Quarkmasse gemäß

$$M = h(\tilde{L}_1/2^2) \frac{Z_A(g_0)}{Z_P(g_0, L/a)} (1 + [b_A - b_P](g_0)am_{q,h}) m^{PCAC}(g_0). \quad (10.0.1)$$

Auch wenn sich wie erwähnt für zwei dynamische Fermionen die neue Strategie noch nicht vollständig anwenden lässt, so wurden doch die Skalierungsfunktionen für zwei Kopplungen in  $N_f = 2$  schon berechnet. Die Ergebnisse und Simulationsparameter sind in den Tabellen C.9 und C.10 zu finden.

## 10.1. $\sigma_Q$ oder $\sigma'_Q$ ?

Wir erinnern uns, dass mit dem in Gleichung (8.1.6) definierten Schwer-Leicht-Strom ebenfalls eine Skalierungsfunktion  $\sigma'_Q$  abgeleitet werden konnte. Wir wollen nun die Frage beantworten, welche Skalierungsfunktion die günstigere ist. Für den ersten Datensatz zu  $u = 2.4484$  wurden  $z$  und  $z'$ , sowie daraus  $\sigma_Q$  und  $\sigma'_Q$  berechnet. Die Ergebnisse sind in den Tabellen C.5, C.6, C.3 und C.4 angegeben. Man erkennt, dass  $z$  und damit auch  $\sigma_Q$  mit einem kleineren Fehler behaftet sind. Wir werden also diese Größen für unsere folgenden Berechnungen verwenden.

## 10.2. Anschluss ans alte Schema

Um den Anschluss an das neue Schema herzustellen, müssen wir auf den zum Matching verwendeten Datensätzen die zu den  $\hat{z}$  gehörigen Werte<sup>1</sup> des Massenparameters  $z = Lm_Q^{hh}$  bestimmen. Die Ergebnisse hierzu sind in Tabelle C.2 zu finden. Aus dem Kontinuumsrimes, für dessen Bestimmung die Daten zu  $L/a = 20$  nicht berücksichtigt wurden, lesen wir nun die Korrespondenz zwischen  $\hat{z}$  und  $z_{max}$  ab:

---

<sup>1</sup>Man beachte, dass in [5] der hier mit  $\hat{z}$  bezeichnete Massenparameter  $z$  genannt wird. Dieser ist nicht mit dem hier in (10.0.1) definierten „neuen“ Massenparameter zu verwechseln.

i	$z_{max}^{(i)}$	$\hat{z}^{(i)}$
1	14.12(1)	10.4
2	16.15(1)	12.1
3	17.55(1)	13.3

### 10.3. Anwendung der Skalierungsfunktion

Der Kernpunkt zur Verbesserung der Genauigkeit im Argument  $z$  liegt nun darin, von  $z_{max}$  ausgehend mit Hilfe der Skalierungsfunktion  $\sigma_Q$  zu  $z_{min}$  gelangen. Hierdurch muss anstatt  $h(L_0)$  wie in (8.0.1), lediglich  $h(\tilde{L}_1/2^2)$  (siehe (10.0.1)) ausgewertet werden, was mit höherer Präzision möglich ist.

Gehen wir nun weiter der neuen Strategie nach. Die zu verwendende Rekursionsformel lautet

$$\begin{aligned} z_1 &= z_{max}, \\ z_{i+1} &= 2\sigma_{\bar{Q}}(u_i, z_i)z_i. \end{aligned} \quad (10.3.1)$$

Man beachte, dass wir uns in der Rekursion rückwärts bewegen, also von  $z_{max}$  starten. Wir haben für die Kopplungen  $\tilde{u}_0 = 2.4484$  und  $\tilde{u}_{-1} = 1.8811$  die Step-Scaling-Funktionen für jeweils drei Werte von  $z$  bestimmt. Hierbei wurde als erste Näherung für die Simulation  $\tilde{z}_{i+1} \approx z_i/2$  gewählt. Die Ergebnisse sind in Tabelle C.3 zusammengestellt. Weiter wird zur Fixierung von  $\tilde{L}_1$  die Bedingung  $u(\tilde{L}_1/4) = 1.8811$  verwendet. Wir müssen also ebenfalls mit einer Rekursion die Kopplung nachführen. Die zugehörige Formel lautet:

$$u_1 = \bar{g}^2(\tilde{L}_1), \quad (10.3.2)$$

$$u_{i+1} = \sigma(u_i). \quad (10.3.3)$$

Die Funktion  $\sigma$  ist für den Fall  $N_f = 0$  in [3] bestimmt. Aus den dort veröffentlichten Werten haben wir ein Polynom für  $\sigma(u)$  bestimmt. Wie in [3] erzwingen wir die Übereinstimmung mit der Störungstheorie bis zur dritten Ordnung, indem wir für das Polynom die Form

$$\sigma(u) = u + \sigma_0 u^2 + \sigma_1 u^3 + \sigma_2 u^4 + \sigma_3 u^5 \quad (10.3.4)$$

annehmen und  $\sigma_0 = 2 \ln(2)b_0$ , sowie  $\sigma_1 = \sigma_0^2 + 2 \ln(2)b_1$  setzen. Die zwei letzten Koeffizienten werden aus einem  $\chi^2$ -Fit bestimmt. Hiermit liefert die Rekursion  $u_{-1} = \tilde{u}_{-1} = 1.8811$  und aus dem Polynom erhalten wir  $u_0 = 2.4544$ .

Nun bestimmen wir aus den Kontinuumswerten von Tabelle C.3<sup>2</sup> ein Doppelpolynom der Form

$$\sigma(u, z) = 1 + u(a_0 + a_1 z + a_2 z^2) + u^2(a_3 + a_4 z + a_5 z^2). \quad (10.3.5)$$

Dies geschieht mit Hilfe eines leicht modifizierten  $\chi^2$ -Fit, um die fehlende Nullte Ordnung in  $u$  zu berücksichtigen. Ein Plot der Messdaten und des Polynoms sind

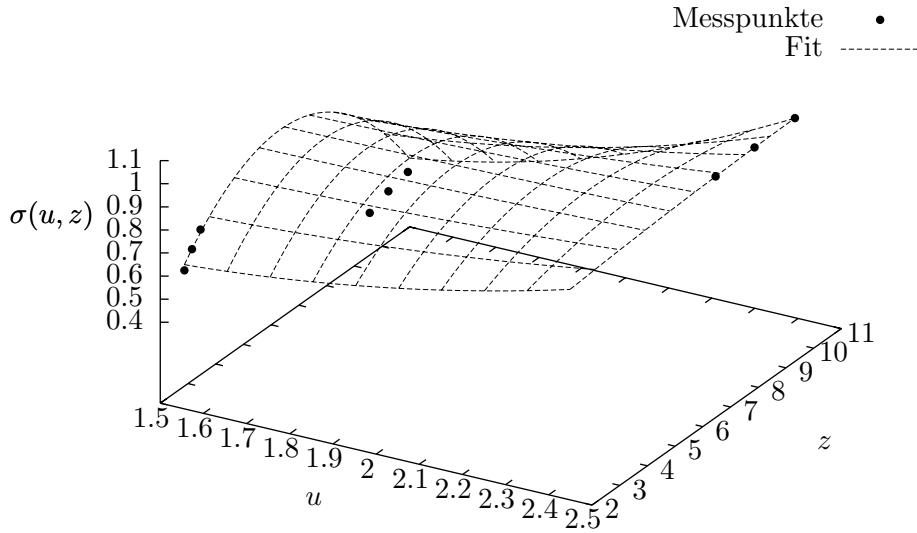


Abbildung 10.1.:  $\sigma(u, z)$ , Messdaten und Fit. Die Fehler sind kleiner als die Symbole.

in Abbildung 10.1 zu finden. Nun können mittels der Rekursion (10.3.1)  $z_0$  und  $z_{-1}$  bestimmt werden. Hierbei merken wir erneut an, dass die Rekursionsformel „rückwärts“ angewendet wird. Man sucht also eine Nullstelle der Funktion

$$f(z_i) = 2\sigma_Q(u_i, z_i)z_i - z_{i+1}, \quad (10.3.6)$$

wobei  $\sigma_Q$  nun durch das Polynom aus Gleichung (10.3.5) gegeben ist. Man beachte weiter, dass wir unsere Analyse für insgesamt drei Startwerte von  $z_{max}$ ,  $z_{max}^{(i)}$ ,  $i = 1, 2, 3$  durchführen, weshalb jedes errechnete  $z$  einen zusätzlichen Index erhält. Die drei Werte sind nötig um sicherzustellen, dass wir in den Ergebnissen für  $M$  sicher zur gewünschten B-Quarkmasse  $M_b$  interpolieren können. Die Ergebnisse der Rekursion in  $z$  sind in der folgenden Tabelle dargestellt.

$i$	$z_0^{(i)}$	$z_{-1}^{(i)}$
1	7.10(2)	3.87(2)
2	8.17(2)	4.33(2)
3	8.94(2)	4.68(1)

Tabelle 10.1.: Ergebnisse der Rekursion in  $z$

<sup>2</sup>Die Kontinuumsextrapolationen der Werte aus Tabelle C.3 ist beispielhaft in den Abbildungen 9.6 und 9.7 zu finden.

## Fehlerrechnung

Merken wir zunächst an, dass jede Extrapolation in  $z$ -Richtung Gefahren birgt. Wie wir bereits erwähnt haben, stammen die Daten für  $z^{(i)}$  bei gegebenem  $u$  aus einer Simulation und sind somit koreliert. Wir wollen dennoch hier und in Abschnitt 10.4 zuerst eine naive Fehlerabschätzung vornehmen, um schließlich eine vollständige Jackknife-Analyse durchzuführen und so eine Lektion über Korelation zu lernen.

Zur ersten Abschätzung der Unsicherheit gehen wir davon aus, dass der Fehler in  $\sigma$  bei der kleinen Verschiebung von  $(\tilde{u}_{i-1}, \tilde{z}_{i-1})$  zu  $(u_{i-1}, z_{i-1})$  konstant bleibt. Damit können wir dann den Fehler in  $z_{i-1}$  angeben als

$$\left( \frac{\Delta z_{i-1}}{z_{i-1}} \right)^2 = \left( \frac{\Delta \sigma(\tilde{u}_{i-1}, \tilde{z}_{i-1})}{\sigma(\tilde{u}_{i-1}, \tilde{z}_{i-1})} \right)^2 + \left( \frac{\Delta z_i}{z_i} \right)^2. \quad (10.3.7)$$

## 10.4. Berechnung der RGI-Quarkmasse

Nachdem nun der Parameter  $z_{min} = z_{-1}$  bekannt ist, kann mit der Formel (10.0.1) die RGI-Masse bestimmt werden.  $z_{min}$  legt hierbei den physikalischen Punkt fest, an dem die PCAC-Masse auszuwerten ist. Zunächst wurde nun  $m^{PCAC}(\tilde{z}_{-1})$  berechnet. Die Ergebnisse sind in Tabelle C.7 dargestellt. Mit den bekannten Werten von  $Z_P$  (aus [3]),  $Z_A$  (aus [15]),  $b_A - b_P$  (aus [10]), und  $h(\tilde{L}_1/4) = 1.671(8)$  erhalten wir nun hieraus  $M$ . Dies beschreiben wir mit einem Polynom

$$M(z) = a_0 + a_1 z + a_2 z^2. \quad (10.4.1)$$

Schließlich wurde dann  $M(z)$  zu den oben berechneten Werten von  $z_{-1}$  verschoben. Damit erhalten wir nun

$$M(z_{-1}^{(1)}) = 5.625(96)\text{GeV} \quad (10.4.2)$$

$$M(z_{-1}^{(2)}) = 6.50(11)\text{GeV} \quad (10.4.3)$$

$$M(z_{-1}^{(3)}) = 7.11(12)\text{GeV}. \quad (10.4.4)$$

## Fehlerrechnung

Die Fehler in  $Z_P$ ,  $Z_A$  und  $b_A - b_P$ , sowie die ungenaue Kenntnis von  $h$  lassen sich mittels Fehlerfortpflanzung in Gleichung (10.0.1) einbeziehen. Wir müssen aber noch dem Fehler in  $z_{-1}$  Rechnung tragen. Dies ist, da die Koeffizienten in Gleichung (10.4.1) schon bekannt sind, eine leichte Aufgabe. Wir können mit

$$\frac{\partial M}{\partial z} = a_1 + 2a_2 z \quad (10.4.5)$$

die Ableitung von  $M$  nach  $z$  approximieren und den Fehler in  $z_{-1}$  mittels

$$\Delta M(u_{-1}, z) = \frac{\partial M(u_{-1}, z)}{\partial z} \Delta z \quad (10.4.6)$$

in einen Fehler in  $M$  übersetzen. Dieser wurde auf die vorhandene Unsicherheit aufgeschlagen.

## 10.5. Wiederholung der Rechnung mit einer Iteration

Bei der Zusammensetzung des Fehlers auf  $M$  spielen die Fehler in  $h$  und in  $\sigma$  zusammen mit der Unsicherheit in  $Z_A$  die größte Rolle. Wir wollen nun beobachten, wie sich der Fehler im Ergebnis verhält, wenn wir nur eine Iteration mit  $\sigma_Q(u_0)$  durchführen und dann direkt ins alte Schema zurückkehren. Für die Funktion  $h(L)$  wurde der Wert  $h(L_0 = L_1/2) = 1.535(11)$  eingesetzt.

Hierbei ergeben sich die folgenden Werte:

$$M(z_0^{(1)}) = 11.55(16)\text{GeV} \quad (10.5.1)$$

$$M(z_0^{(2)}) = 13.59(19)\text{GeV} \quad (10.5.2)$$

$$M(z_0^{(3)}) = 14.98(22)\text{GeV}. \quad (10.5.3)$$

Die weitere Stelle der Fehler soll den Vergleich mit (10.4.2)-(10.4.4) erleichtern. Die Fehler verringern sich hierdurch von durchschnittlich (über die  $z$  gemittelt) 1.65% auf 1.4%.

## 10.6. Übersicht über die Beiträge der einzelnen Fehlerquellen

In Tabelle 10.2 wird eine Übersicht über die relativen Fehler der zur Berechnung von  $M$  benötigten Größen beim Vorgehen mit zwei Schritten in  $\sigma_Q$  vor der quadratischen Addition angegeben. Der Fehler, der mit  $\Delta\sigma_Q$  bezeichnet ist, bezieht sich auf  $\sigma_Q(u_0)$  und  $\sigma_Q(u_{-1})$  und errechnet sich aus

$$\Delta\sigma_Q = \sqrt{\left(\frac{\Delta\sigma(u_0)}{\sigma_Q(u_0)}\right)^2 + \left(\frac{\Delta\sigma(u_{-1})}{\sigma_Q(u_{-1})}\right)^2}. \quad (10.6.1)$$

Die Fehlerangaben sind der Übersichtlichkeit halber über alle drei betrachteten Werte von  $z$  gemittelt.

$\Delta\sigma_Q$	$\Delta Z_A$	$\Delta Z_P$	$\Delta h(\tilde{L}_1/4)$
0.36%	0.40%	0.12%	0.48%

Tabelle 10.2.: Übersicht der Fehlerbeiträge

Eine quadratische Addition der oben stehenden Fehler ergibt einen relativen Fehler von 0.73%. Der Rest des Fehlers in  $M$  röhrt von der Unsicherheit in  $z_{max}$  her, der nach Gleichung (10.4.6) aufgeschlagen wurde. Die Fehler bei nur einer Anwendung von  $\sigma_Q$  verhalten sich wie folgt: Der Fehler in  $\sigma_Q$  reduziert sich auf

den in Tabelle C.3 angegebenen Wert von 0.23%, während  $h(L_0)$  nun mit einem Fehler von 0.72% behaftet ist.

## 10.7. Wiederholung der Rechnung in Jackknife-Samples

Um die Koredation in  $z$ -Richtung sowohl bei  $\sigma$  als auch  $m^{PCAC}$  sicher unter Kontrolle zu haben, wurde wie angekündigt die Auswertung nun komplett in Jackknife-Samples wiederholt. Das bedeutet, dass nach dem Berechnen der Skalierungsfunktion  $\Sigma$  der Kontinuumslices in Jackknife-Samples durchgeführt wurde. Für  $z_{max}$  wurden dann ebenfalls Jackknife-Samples berechnet und die Rekursionsformel (10.3.1) auf die Jackknife-Samples angewendet. Die Berechnung von  $M$  erfolgt dann genauso in Jackknife-Samples, die aus der Berechnung von  $m^{PCAC}(\tilde{z}_{-1})$  stammen. Nun wurde für jedes Sample  $M_i^{JN}(\tilde{z}_{-1})$  zu  $M_i^{JN}(z_{min})$  verschoben. Dies macht die Formeln (10.4.6) und (10.3.7) für die Fehlerrechnung überflüssig. Um diese Methode anwenden zu können, mussten selbstverständlich alle Analysen derart ausgeführt werden, dass eine feste Anzahl an Jackknife-Samples für jede Observable vorliegen. Wir haben hierzu  $N_{JN} = 80$  gewählt und unsere Monte-Carlo-Daten durch Bining und Abschneiden der ersten Messungen auf diese Länge gebracht.

Es ergeben sich folgende Resultate:

$i$	$M(z_{-1}^{(i)})$	$M(z_0)^{(i)})$
1	5.670(40)	11.42(10)
2	6.493(45)	13.10(11)
3	7.099(49)	14.29(12)

Tabelle 10.3.: Ergebnisse aus der Jackknife-Analyse

Wie wir sehen, wurde in der ersten Abschätzung der Fehler grob überschätzt und der tatsächliche Fehler ist etwa um einen Faktor 2 kleiner.

## 10.8. Bestimmung von $M_b$

Mit den in [5] angegebenen Daten können wir die Lösung der Gleichung (7.3.6) in unserem Schema berechnen. Hierzu müssen wir nur den Parameter von  $\Phi_1$  in die von uns berechneten Werte abändern. Die Lösung mit  $M(z_0)$  als Parameter ist in Abbildung 10.2 graphisch aufgetragen. Wir erhalten mit dem Fehler in  $M$  auf das Fehlerband aufgeschlagen eine Quarkmasse von

$$M_b^{(0)} = 6.707(72) \text{ GeV}, \quad (10.8.1)$$

was mit dem Ergebnis von  $M_b^{(0)} = 6.806(79) \text{ GeV}$  aus [5] innerhalb der Fehler übereinstimmt.

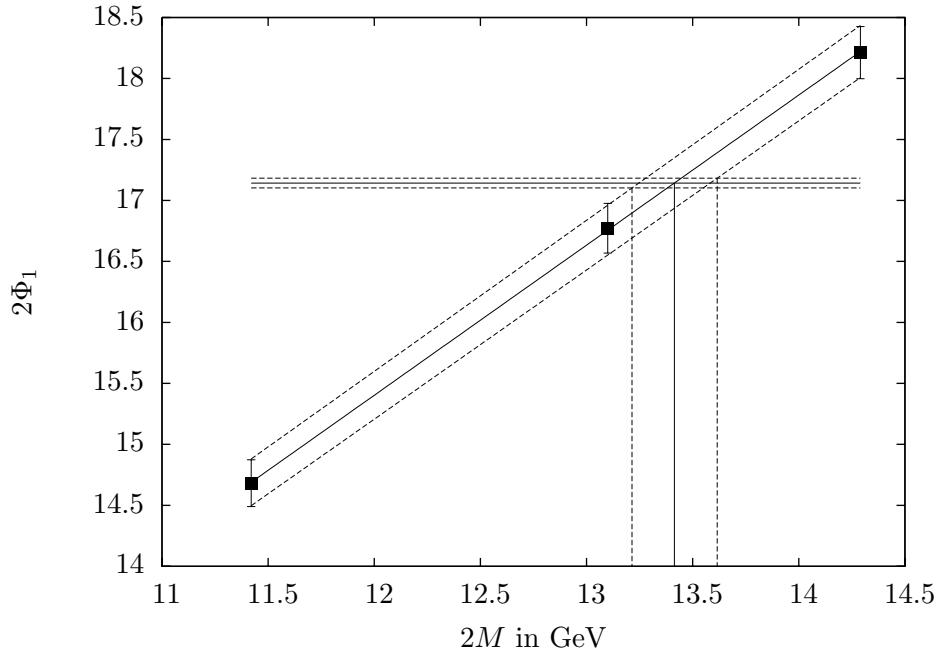


Abbildung 10.2.: Graphische Lösung von Gleichung (7.3.6). Die Datenpunkte sind die Ergebnisse für  $2\Phi_1$ , der horizontale Fehlerbalken  $L_2 m_B^{av} - \sigma_m - L_2 m_B^{(0b)}$  (nach Abbildung 8 in [5]).

## 10.9. Untersuchung der Gültigkeit der $O(a)$ -Verbesserung

Um sicherzugehen, dass die Annahme, dass für  $f_P$  eine  $O(a)$ -Verbesserung vorliegt, korrekt ist, wurden  $\Sigma_Q(L/a = 8, u = 2.4484)$  und  $\Sigma'_Q(L/a = 8, u = 2.4484)$  bei falschen Werten für die Verbesserungskoeffizienten  $c_t$  und  $\tilde{c}_t$  berechnet. Hierbei wurden diese um einen Faktor von 2 (für  $c_t$ ) bzw. von 10 (für  $\tilde{c}_t$ ) vergrößert. Die Ergebnisse sind in Tabelle C.8 zusammengestellt. Wir bemerken nur eine schwache Abhängigkeit der Ergebnisse von den Verbesserungskoeffizienten selbst bei der größten Gitterauflösung. Eine Extrapolation  $(a/L)^2 \rightarrow 0$  ist also legitim.



# 11. Schlusswort

Wie wir gesehen haben, lässt sich mit Hilfe der neuen Strategie der Fehler auf  $M_b$  tatsächlich verringern. Wenn auch dieser Effekt bei den Rechnungen ohne dynamische Fermionen nicht sehr ins Gewicht fällt, verrät ein vergleichender Blick auf Tabellen C.3 und C.10 doch, dass bei zwei dynamischen Fermionen mehr Potential für Verbesserungen besteht. Sobald die fehlenden Simulationen abgeschlossen sind, wird sich die hier vorgestellte Strategie sicherlich als sehr nützlich erweisen. Da in die Bestimmung der b-Quarkmasse eine Vielzahl von Größen eingeht, die alle für sich mit einem Fehler behaftet sind, kann man selbstverständlich von einer Reparametrisierung keine Wunder erwarten. Will man jedoch auf lange Sicht einen Widerspruch zwischen Experiment und Theorie finden, ist es unerlässlich präzise Vorhersagen zu treffen und deren Genauigkeit nach und nach zu steigern. Somit ist auch eine geringe Verkleinerung des Fehlers theoretischer Vorhersagen sicherlich ein Schritt in die richtige Richtung.

Eine Möglichkeit zur weiteren Steigerung der Präzision besteht noch darin, den Faktor  $Z_A/Z_P$ , der in Gleichung (8.1.12) eingeht, direkt zu bestimmen, anstatt  $Z_A$  und  $Z_P$  einzeln zu errechnen. Einige schon ausgeführte Test geben Hinweis darauf, dass hier noch Raum für Verbesserungen ist.

## Danksagung

Ich möchte mich zuerst bei PD. Dr. Jochen Heitger für die Betreuung meiner Diplomarbeit und Bereitstellung des Themas bedanken. Ohne die vielen Diskussionen mit ihm sowie, Ratschläge und Hilfestellungen von ihm, wäre diese Arbeit mit Sicherheit nicht entstanden.

Patrick Fritzsch hatte immer ein offenes Ohr für Fragen und stand mir stets mit Rat und Tat zur Seite.

Wichtige Vorschläge und Anmerkungen habe ich auch von Dr. Rainer Sommer erhalten. Seine Ratschläge haben zum Gelingen der hier vorgestellten Untersuchungen beigetragen.

Weiter möchte ich noch Prof. Dr. Gernot Münster meinen Dank aussprechen, der sich bereit erklärt hat, ein Zweitgutachten für diese Arbeit zu erstellen.

Dank gebührt schließlich noch der ALPHA-Kollaboration, deren Mitglieder einige der von mir verwendeten Simulationsprogramme geschrieben haben.



## A. $1/m_B$ -Entwicklung

Wir möchten der Vollständigkeit halber die  $1/m_B$ -Entwicklung der in [5] zur Bestimmung von  $m_B$  verwendeten Größen angeben. Zentral sind hier die Zeitkomponente  $A_0$  und die Ortskomponenten  $V_k$  des Schwer-Leicht-Axialvektorstroms. Diese wurden in Abschnitt 7 definiert. Ihre HQET-Entwicklung lautet

$$A_0^{HQET}(x) = Z_A^{HQET} \left[ A_0^{stat} + c_A^{HQET} \delta A_0^{stat}(x) \right], \quad (\text{A.0.1})$$

$$A_0^{stat}(x) = \bar{\psi}_l(x) \gamma_0 \gamma_5 \psi_h(x), \quad (\text{A.0.2})$$

$$\delta A_0^{stat}(x) = \bar{\psi}_l(x) \frac{1}{2} (\vec{\nabla}_i + \vec{\nabla}_i^*) \gamma_i \gamma_5 \psi_h(x). \quad (\text{A.0.3})$$

bzw.

$$V_0^{HQET}(x) = Z_V^{HQET} \left[ V_k^{stat} + c_V^{HQET} \delta V_k^{stat}(x) \right], \quad (\text{A.0.4})$$

$$V_k^{stat}(x) = \bar{\psi}_l(x) \gamma_0 \gamma_k \psi_h(x), \quad (\text{A.0.5})$$

$$\delta V_k^{stat}(x) = -\bar{\psi}_l(x) \frac{1}{2} (\vec{\nabla}_i + \vec{\nabla}_i^*) \gamma_i \gamma_k \psi_h(x). \quad (\text{A.0.6})$$

Die Parameter  $\omega_{kin}, \omega_{spin}, Z_A^{HQET}, c_A^{HQET}, Z_V^{HQET}$  und  $c_V^{HQET}$  sind nun Funktionen der nackten Parameter  $g_0$  und  $m_B$  der vollen Theorie. Sie müssen im Matchingschritt angepasst werden, um die entstehenden Divergenzen herauszuheben. Man kann damit für die zentrale Größe  $C_{AA}$  die Entwicklung angeben als

$$C_{AA}(x_0) = e^{-m_{bare}x_0} (Z_A^{HQET})^2 a^3 \sum_x \left[ \langle A_0^{stat}(x) (A_0^{stat}(0))^\dagger \rangle_{stat} \right. \quad (\text{A.0.7})$$

$$\begin{aligned} &+ \omega_{kin} \langle A_0^{stat}(x) (A_0^{stat}(0))^\dagger \rangle_{kin} + \omega_{spin} \langle A_0^{stat}(x) (A_0^{stat}(0))^\dagger \rangle_{spin} \\ &+ c_A^{HQET} \langle A_0^{stat}(x) (\delta A_0^{stat}(0))^\dagger \rangle_{stat} + c_A^{HQET} \langle \delta A_0^{stat}(x) (A_0^{stat}(0))^\dagger \rangle_{stat} \end{aligned} \quad (\text{A.0.8})$$



# B. Dokumentation der C++-Klassen

## B.1. Measurement

Die Klasse `Measurement` ist eine C++-Klasse zum Auswerten von Monte-Carlo-Daten. Die aktuelle Version ist unter

[http://pauli.uni-muenster.de/~d\\_hess01/measclass/](http://pauli.uni-muenster.de/~d_hess01/measclass/)

zu finden. Für die zu den Funktionen angegebenen Formeln wird angenommen, dass eine Stichprobe  $\{f_t\}$  mit Umfang  $n$  vorliegt. Diese habe den Mittelwert  $\mu = \langle f_t \rangle = \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n f_s$ .

### Konstruktoren

`Measurement()` : Konstruiert ein `Measurement`-Objekt, dessen `dataPoints`-Member auf `NULL` zeigt. `JNresampled` wird auf `false`, `Nreplica` auf 1 gesetzt.

`Measurement ( float* d, int n )` : Erzeugt ein `Measurement`-Objekt, setzt `N` auf den Wert `n` und den `dataPoints`-Pointer auf die Adresse von `d`. `Nreplica` wird mit 1 initialisiert.

`Measurement ( char* f, int size, int offset, int step )` : Erzeugt ein `Measurement`-Objekt und ruft die Methode `read(f, size, offset, step)` auf. Effektiv wird also ein Objekt erzeugt, welches die Datei mit Namen `f` einliest.

### Operatoren

Die grundlegenden arithmetischen Operationen `+, -, *, /` sind für die `Measurement`-Klasse überladen. Sie sind sowohl für zwei Objekte des `Measurement`-Typs, als auch für ein `Measurement`-Objekt und eine Fließkommazahl definiert. Sind `a, b` und `c` `Measurement`-Objekte, sind also sowohl Anweisungen der Form `c = a + b`, als auch `c = 0.5 + a` usw. erlaubt. Ebenso sind die Zuweisungsoperatoren `+=, -=, *=, /=` definiert. Eine Schreibweise wie `a += b` oder `a *= 0.5` ist also ebenfalls gültig.

Bei der Anwendung aller überladener Operatoren werden die Rechenoperationen innerhalb der Samples durchgeführt. Bei einer arithmetischen Verknüpfung zweier Objekte des `Measurement`-Typs, wird die Anzahl der Samples verglichen

und als Ergebnis ein `Measurement`-Objekt mit der geringeren Anzahl an Samples zurückgegeben.

## Member-Variablen

Alle Member-Variablen der Klasse `Measurement` sind als `private` deklariert, also nur über die entsprechenden `get`- und `set`-Methoden anzusprechen.

`float* dataPoints`: In diesem Array, welches nach dem Einlesen der Daten (z.B. mit `read`) die Länge `N` hat, werden die Messdaten gespeichert.

`float S`: Die Größe `S` steuert die Empfindlichkeit des Algorithmus zur automatischen Bestimmung der Integrationsfenstergröße für die Bestimmung der integrierten Autokorelationszeit nach Wolff [25]. Empfohlen werden Werte zwischen 1.5 und 2, als Standardwert wird im Konstruktor `S = 1.6` gesetzt. Näheres findet sich in [25].

`int N`: Anzahl der Datenpunkte und damit Länge von `dataPoints`. Für die folgende Notation sein  $n = N$ .

`int nReplica`: Anzahl der Replika. In einer Datei, die die Daten aus einer Monte-Carlo-Simulation enthält, werden für jede Messung die Messdaten für die Replika hintereinander abgespeichert sein. Für eine spätere Aufbereitung der Daten ist es allerdings sinnvoll und nötig, dass die Daten zuerst nach Messungen, dann nach Replika geordnet sind, also zunächst alle Messungen des ersten, dann des zweiten Replikums usw. stehen. Hierfür ist die Methode `replicaReorder` entworfen worden.

`bool JNresampled`: Diese Flag gibt an, ob `jackknifeResample` bereits aufgerufen wurde. Sie kann aber auch manuell gesetzt werden. Nach dem Wert von `JNresampled` entscheidet sich auch, welche Methode zur Berechnung des Fehlers (Jackknife oder Standardabweichung) verwendet wird.

## Methoden

`void setData ( float* d, int N )`: Setzt die Datenpunkte `dataPoints` auf `d` und die gespeicherte Länge des Arrays auf `N`. Eine korrekte Angabe von `N` ist sehr wichtig. Bei zu kleiner Angabe werden nicht alle Datenpunkte berücksichtigt, während eine zu große Angabe Abstürze zur Folge hat.

`void setData ( float d, int k )`: Setzt, falls  $k < \text{dataPoints}$ , den `k`-ten Datenpunkt auf den Wert von `d`.

`void setJackknife ( bool b )`: Setzt die `jackknifeResample`-Flag auf den Wert `b`. Sobald `b` den Wert `true` hat, wird bei `sigma` die Jackknife-Formel für den Fehler verwendet.

**float C ( int t ):** Berechnet die unnormierte Autokorelationsfunktion (siehe z.B. [25]). Die zugehörige Formel lautet

$$C(t) = \langle f_s f_{s+t} \rangle - \mu^2 = \frac{1}{n - |t|} \sum_{i=1}^{n-|t|} (f_i - \mu)(f_{i+|t|} - \mu). \quad (\text{B.1.1})$$

**float rho ( int t ):** Berechnet die normierte Korelationsfunktion

$$\rho(t) = C(t)/C(0). \quad (\text{B.1.2})$$

**float tint ( int W ):** Berechnet die integrierte Autokorelationszeit  $\tau_{int}$  mit Integrationsfenster  $W$ . Dieses Fenster ist bei diskreter Berechnung der Autokorelationsfunktion nötig, da  $\rho(t)$  für  $|t| \gg \tau_{int}$  viel Rauschen enthält. Näheres ist in [21] zu finden. Die intern verwendete Formel lautet

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} \sum_{t=-(n-1)}^{(n-1)} \lambda(t) \rho(t), \quad (\text{B.1.3})$$

mit

$$\lambda(t) = \begin{cases} 1 & , |t| \leq W \\ 0 & sonst. \end{cases} \quad (\text{B.1.4})$$

Die Summationsgrenzen stellen sicher, dass nicht über die Anzahl der Samples hinaus summiert wird,  $\lambda$  ist das eigentliche Fenster.

Ein sinnvoller Aufruf wäre `instanz.tint ( instanz.getW )`.

**void read ( char\* name, int size, int offset, int step):** Liest aus einer Binärdatei mit Namen `name` (falls diese existiert, Pfadangabe nicht vergessen) Stücke der Länge `size` bytes (also `size = 8`, falls `doubles` in der Datei stehen, `size = 4` für `floats`) ab dem `offset`-ten byte, alle `step` bytes, bis das Ende der Datei erreicht ist, reinterpretsiert diese als `float` und speichert sie in `dataPoints`. Anschließend wird `N` auf die Anzahl der gelesenen Datenpunkte und `JNresampled` auf `false` gesetzt.

**void replicaReorder ( int k ):** Stehen in einer eingelesenen Datei die Daten in der Reihenfolge, in der sie in der Simulation erzeugt wurden, werden diese zuerst nach Messungen, dann nach Replika geordnet sein. Diese Ordnung erschwert z.B. die Berechnung der Autokorelationsfunktion und muss beim Bining berücksichtigt werden. `replicaReorder` ordnet das Array `dataPoints` derart um, dass die darin enthaltenen Daten zuerst nach Replika, dann nach Messungen geordnet sind, d.h. pro Replikum zuerst alle Messungen in `dataPoints` stehen, danach erst die Daten des nächsten Replikums folgen. Für die Länge von `dataPoints` wird `N` angenommen, die Anzahl der Replika wird mit `k` angegeben. Ein sinnvoller Aufruf wäre also `replicaReorder( getNreplica() )`.

**void setS( float s):** Setzt **S** auf den Wert von **s**.  
**void jackknifeResample():** Führt das Jackknife-Resampling durch. Die Datenpunkte in **dataPoints** werden entsprechend der Vorschrift

$$f_s \rightarrow \frac{1}{n-1} \left[ \left( \sum_{i=1}^n f_i \right) - f_s \right] \quad s = 1 \dots n \quad (\text{B.1.5})$$

transformiert und **JNresampled** auf **true** gesetzt.

**void bin ( int k):** Für ein Bining durch. Idealerweise sollte **N** ein ganzzahliges Vielfaches von **k** sein. Die Routine ersetzt

$$f_s \rightarrow \frac{1}{k} \sum_{i=(s-1)k+1}^{sk} f_i \quad s = 1 \dots \lfloor n/k \rfloor \quad (\text{B.1.6})$$

und setzt **N** auf  $\lfloor n/k \rfloor$ . Ist **k** also kein Teiler von **N**, gehen  $n - \lfloor n/k \rfloor k$  Datenpunkte verloren. Sinnvollerweise wird bei einer Messung mit Replika vor **bin** die Funktion **replicaReorder** aufgerufen.

**void cutoff(int n, int k):** Schneidet bei **k** vorhandenen Replika die ersten **n** Messungen ab. Muss vor **replicaReorder** aufgerufen werden, da es von Daten, die zuerst nach Messungen, dann nach Replika geordnet sind, ausgeht. Einfacher gesprochen werden also die **nk** ersten Elemente aus **dataPoints** abgeschnitten. Zwei Argumente sollen lediglich sicherstellen, dass man weiß, was man tut.

**bool isJackknife():** Gibt den Wert von **JNresampled** zurück.

**float mean():** Gibt den Mittelwert

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_i f_i \quad (\text{B.1.7})$$

zurück.

**float sigma():** Gibt je nach Wert von **JNresampled** den Fehler mittels der Formel

$$\sigma^2 = \begin{cases} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (f_i - \mu)^2 & \text{JNresampled} = \text{false} \\ \frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^n (f_i - \mu)^2 & \text{JNresampled} = \text{true} \end{cases} \quad (\text{B.1.8})$$

zurück. Es wird ersichtlich, wieso stets darauf zu achten ist, dass **JNresampled** den korrekten Wert enthält.

**float getS():** Liefert den Wert von **S**.

**int getN():** Liefert den Wert von **N**.

`int getNreplica():` Liefert den Wert von `nReplica`.

`int getW():` Berechnet den optimalen Wert für die Länge  $W$  des Integrationsfensters bei der Berechnung der integrierten Autokorelationsfunktion  $\tau_{int}$  nach der in [25] vorgestellten selbstkonsistenten Methode von Wolff. Diese findet in der Praxis sehr zuverlässig die korrekte Fenstergröße. Sie beruht auf der Beobachtung, dass  $\tau_{int}$  gegen  $W$  aufgetragen im Bereich der korrekten Fenstergröße ein Plateau erreicht. Dieses identifiziert die Funktion, indem nach einem Vorzeichenwechsel in der Größe

$$g(w) = \exp[-W/\tau(W)] - \tau(W)/\sqrt{Wn} \quad (\text{B.1.9})$$

sucht. Näheres findet man in [25].

`void setNreplica( int k ):` Setzt `nReplica` auf den Wert `k`.

`float getDataPoint ( int k ):` Liefert, falls  $k < n$ , den  $k$ -ten Eintrag von `dataPoints`.

## B.2. Data

`Data` ist eine weitere nützliche Klasse, die einen Messwert mit Fehler in das präferierte Format Wert(Fehler der letzten Stelle) bringt.

### B.2.1. Konstruktoren

`Data (float x, float sigma) :` Erzeugt ein Objekt der Klasse `Data` Klasse mit Messwert `x` und Fehler `sigma`.

`Data () :` Erzeugt ein `Data`-Objekt, `x` und `sigma` haben den Wert 1.0, um Komplikationen zu vermeiden.

### B.2.2. Variablen

`float x:` Speichert den Messwert `x`.

`float sigma:` Speichert den Fehler von `x`.

### B.2.3. Methoden

`friend std::ostream& operator<<( std::ostream&, Data& ) :` Überlädt einen `ostrem <<`-Operator auf der `Data`-Klasse. Somit lässt sich eine Ausgabe auf `stdout` oder einem anderen Objekt des Typs `std::ostrem` (z.B. einer Datei) der Form gerundeter Messwert ( signifikante gerundete Stelle des Fehlers ) erzeugen.

`void setX (float xx) :` Setzt den Wert von `x` auf `xx`.

`void setSigma (float ssigma) : Setzt den Wert von sigma auf ssigma.`

`char* TeXerror() : Gibt die wie oben beschrieben formatierte Angabe des Wertes x mit Fehler als C-String, also als char* zurück. Der Zugriff mittels des oben definierten Operators << ist allerdings deutlich komfortabler.`

## C. Tabellen

### C.1. Quenched

$u$	#	$L$	$N_{\text{meas}}$	$\beta$	$\kappa_c$	$\kappa_h^{(1)}$	$\kappa_h^{(2)}$	$\kappa_h^{(3)}$
2.4484	1	8	360	7.0197	0.134639	0.121815	0.118519	0.114977
	2	16	180	7.0197	0.134639	0.121815	0.118519	0.114977
	3	10	160	7.2025	0.134380	0.124508	0.122084	0.119573
	4	20	120	7.2025	0.134380	0.124508	0.122084	0.119573
	5	12	720	7.3551	0.134141	0.126158	0.124178	0.122131
	6	24	180	7.3551	0.134141	0.126158	0.124178	0.122131
	7	16	180	7.6101	0.133729	0.127971	0.126576	0.125131
	8	32	90	7.6101	0.133729	0.127991	0.126578	0.125115
1.8811	1	6	400	7.4082	0.133961	0.126973	0.124822	0.122563
	2	12	800	7.4082	0.133961	0.126973	0.124822	0.122563
	3	8	1600	7.6547	0.133632	0.128507	0.127000	0.125417
	4	16	200	7.6547	0.133632	0.128507	0.127000	0.125417
	5	12	800	7.9993	0.133159	0.129946	0.129005	0.128018
	6	24	200	7.9993	0.133159	0.129946	0.129005	0.128018
	7	16	200	8.2415	0.132847	0.130465	0.129787	0.129075
	8	32	172	8.2415	0.132847	0.130465	0.129787	0.129075
1.5553	1	6	800	7.9993	0.133118	0.131076	0.130138	0.129101
	2	12	600	7.9993	0.133118	0.131076	0.130138	0.129101
	3	8	1600	8.2500	0.132821	0.131444	0.130753	0.129989
	4	16	200	8.2500	0.132821	0.131444	0.130753	0.129989
	5	12	400	8.5985	0.132427	0.131497	0.131056	0.130569
	6	24	200	8.5985	0.132427	0.131497	0.131056	0.130569
	7	16	180	8.8323	0.132169	0.131536	0.131203	0.130834
	8	32	120	8.8323	0.132169	0.131536	0.131203	0.130834

Tabelle C.1.: Überblick über die Simulationsparameter,  $N_f = 0$

$L$	$z_{max}^{(1)}$	$z_{max}^{(2)}$	$z_{max}^{(3)}$
20	14.855(4)	17.314(5)	19.187(4)
24	14.573(6)	16.854(5)	18.516(5)
32	14.365(5)	16.535(5)	18.077(5)
40	14.30(1)	16.43(1)	17.935(9)
$CL$	14.12(1)	16.15(1)	17.55(1)

Tabelle C.2.: Werte für  $z_{max}$

$u$	$L$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_0^{(1)})$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_0^{(2)})$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_0^{(3)})$
$\tilde{u}_0 = 2.4484$	8	1.011(1)	1.016(1)	1.019(1)
	10	1.009(2)	1.014(1)	1.017(1)
	12	1.006(1)	1.013(1)	1.015(1)
	16	1.005(2)	1.011(1)	1.014(1)
	$CL$	1.002(3)	1.009(2)	1.012(2)
$u$	$L$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_{-1}^{(1)})$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_{-1}^{(2)})$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_{-1}^{(3)})$
$\tilde{u}_{-1} = 1.8811$	6	0.913(2)	0.949(1)	0.973(1)
	8	0.908(2)	0.944(1)	0.968(1)
	12	0.906(2)	0.943(2)	0.966(1)
	16	0.903(3)	0.939(3)	0.964(2)
	$CL$	0.904(3)	0.940(3)	0.964(2)
$\tilde{u}_{-2} = 1.5553$	6	0.689(3)	0.751(2)	0.805(2)
	8	0.674(4)	0.740(3)	0.795(3)
	12	0.665(4)	0.731(4)	0.788(3)
	16	0.665(7)	0.732(6)	0.788(5)
	$CL$	0.648(7)	0.717(6)	0.776(5)

Tabelle C.3.: Ergebnisse für  $\Sigma_Q$

$u$	$L$	$\Sigma'_Q(u, z^{(1)}, a/L)$	$\Sigma'_Q(u, z^{(2)}, a/L)$	$\Sigma'_Q(u, z^{(3)}, a/L)$
$2.4484$	8	0.937(3)	0.956(2)	0.968(2)
	10	0.935(3)	0.953(3)	0.966(2)
	12	0.935(2)	0.952(2)	0.966(2)
	16	0.930(4)	0.948(3)	0.962(3)
	$CL$	0.928(6)	0.946(5)	0.960(4)

Tabelle C.4.: Werte für  $\Sigma'_Q$ .

#	$z^{(1)}$	$z^{(2)}$	$z^{(3)}$
1	7.267(8)	8.673(7)	10.131(7)
2	7.345(5)	8.816(5)	10.319(5)
3	7.27(1)	8.67(1)	10.13(1)
4	7.334(6)	8.792(6)	10.303(6)
5	7.268(5)	8.674(5)	10.129(5)
6	7.317(5)	8.777(5)	10.288(5)
7	7.267(9)	8.673(9)	10.130(9)
8	7.311(7)	8.765(7)	10.272(7)

Tabelle C.5.: Die Ergebnisse für  $z$  aus den Simulationen für  $u = 2.4484$ .

#	$z'^{(1)}$	$z'^{(2)}$	$z'^{(3)}$
1	4.35(1)	5.051(9)	5.780(9)
2	4.079(7)	4.827(7)	5.593(7)
3	4.34(1)	5.04(1)	5.76(1)
4	4.061(9)	4.801(9)	5.568(9)
5	4.340(6)	5.036(6)	5.757(7)
6	4.055(7)	4.794(7)	5.559(7)
7	4.35(1)	5.04(1)	5.76(1)
8	4.04(1)	4.78(1)	5.54(1)

Tabelle C.6.: Die Ergebnisse für  $z'$  aus den Simulationen für  $u = 2.4484$ .

$L$	$Lm^{PCAC}(u_{-1}, z_{-1}^{(1)})$	$Lm^{PCAC}(u_{-1}, z_{-1}^{(1)})$	$Lm^{PCAC}(u_{-1}, z_{-1}^{(1)})$
6	1.267(2)	1.668(2)	2.107(2)
8	1.235(1)	1.600(1)	1.990(1)
12	1.1655(9)	1.5027(9)	1.8573(9)
16	1.158(1)	1.482(2)	1.823(2)
$CL$	1.119(1)	1.432(1)	1.758(1)

Tabelle C.7.: Ergebnisse für  $\tilde{L}_1/4m^{PCAC}$

$i$	$\Sigma'_Q$	$c'_t$	$\tilde{c}'_t$	$\Sigma_Q$	$c'_t$	$\tilde{c}'_t$
1	0.937(3)	0.934(3)	0.945(4)	1.011(1)	1.007(1)	1.015(2)
2	0.956(2)	0.951(3)	0.961(3)	1.016(1)	1.012(1)	1.018(1)
3	0.968(2)	0.965(2)	0.973(3)	1.019(1)	1.016(1)	1.021(1)

Tabelle C.8.: Daten der Testsimulationen bei  $L/a = 8$  und  $u = 2.4484$ .

## C.2. $N_f = 2$

$u$	#	$L$	$N_{\text{meas}}$	$\beta$	$\kappa_c$	$\kappa_h^{(1)}$	$\kappa_h^{(2)}$	$\kappa_h^{(3)}$
2.4792	1	6	320	6.13300	0.136110	0.118032	0.113273	0.108343
	2	12	320	6.13300	0.136110	0.118032	0.113273	0.108343
	3	8	320	6.32290	0.135767	0.123130	0.119916	0.116586
	4	16	320	6.32290	0.135767	0.123130	0.119916	0.116586
	5	12	280	6.63164	0.135227	0.127518	0.125525	0.123461
	6	24	192	6.63164	0.135227	0.127518	0.125525	0.123461
2.0142	1	6	768	6.60850	0.135260	0.128307	0.126227	0.124119
	2	12	192	6.60850	0.135260	0.128307	0.126227	0.124119
	3	8	296	6.82170	0.134891	0.129862	0.128406	0.126930
	4	16	224	6.82170	0.134891	0.129862	0.128406	0.126930
	5	12	400	7.09300	0.134432	0.131280	0.130371	0.129449
	6	24	128	7.09300	0.134432	0.131280	0.130371	0.129449

Tabelle C.9.: Überblick über die Simulationsparameter,  $N_f = 2$ .

$u$	$L$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_0^{(1)})$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_0^{(2)})$	$\Sigma_Q(u, a/L, \tilde{z}_0^{(3)})$
2.4792	6	1.011(1)	1.017(1)	1.0203(8)
	8	1.007(1)	1.014(1)	1.0169(9)
	12	0.997(2)	1.007(2)	1.011(1)
	$CL$	0.996(2)	1.006(2)	1.010(1)
2.0142	6	0.753(4)	0.802(4)	0.841(3)
	8	0.763(5)	0.811(5)	0.850(4)
	12	0.751(7)	0.799(6)	0.838(5)
	$CL$	0.759(8)	0.806(7)	0.844(6)

Tabelle C.10.: Ergebnisse für  $\Sigma_Q$ ,  $N_f = 2$ .

# Literaturverzeichnis

- [1] A. A. Belavin, Alexander M. Polyakov, A. S. Shvarts, and Yu. S. Tyupkin, *Pseudoparticle solutions of the yang-mills equations*, Phys. Lett. **B59** (1975), 85–87.
- [2] P. Boucaud, Lin Chyi Lung, and O. Pene, *B meson decay constant on the lattice and renormalization*, Phys. Rev. **D40** (1989), 1529.
- [3] Stefano Capitani, Martin Luscher, Rainer Sommer, and Hartmut Wittig, *Non-perturbative quark mass renormalization in quenched lattice qcd*, Nucl. Phys. **B544** (1999), 669–698.
- [4] Michele Della Morte et al., *Non-perturbative quark mass renormalization in two-flavor qcd*, Nucl. Phys. **B729** (2005), 117–134.
- [5] Michele Della Morte, Nicolas Garron, Mauro Papinutto, and Rainer Sommer, *Heavy quark effective theory computation of the mass of the bottom quark*, JHEP **01** (2007), 007.
- [6] Estia Eichten and Brian Russell Hill, *An effective field theory for the calculation of matrix elements involving heavy quarks*, Phys. Lett. **B234** (1990), 511.
- [7] Estia Eichten and Brian Russell Hill, *Renormalization of heavy - light bilinears and  $f(b)$  for wilson fermions*, Phys. Lett. **B240** (1990), 193.
- [8] Jochen Heitger, Martin Kurth, and Rainer Sommer, *Non-perturbative renormalization of the static axial current in quenched qcd*, Nucl. Phys. **B669** (2003), 173–206.
- [9] Jochen Heitger and Rainer Sommer, *Non-perturbative heavy quark effective theory*, JHEP **02** (2004), 022.
- [10] Jochen Heitger and Jan Wennekers, *Effective heavy-light meson energies in small-volume quenched qcd*, JHEP **02** (2004), 064.
- [11] A. D. Kennedy, *Algorithms for dynamical fermions*, (2006).
- [12] Martin Kurth and Rainer Sommer, *Renormalization and  $o(a)$ -improvement of the static axial current*, Nucl. Phys. **B597** (2001), 488–518.
- [13] Martin Kurth and Rainer Sommer, *Heavy quark effective theory at one-loop order: An explicit example*, Nucl. Phys. **B623** (2002), 271–286.

- [14] Martin Luscher, Rajamani Narayanan, Peter Weisz, and Ulli Wolff, *The schrodinger functional: A renormalizable probe for nonabelian gauge theories*, Nucl. Phys. **B384** (1992), 168–228.
- [15] Martin Luscher, Stefan Sint, Rainer Sommer, and Hartmut Wittig, *Non-perturbative determination of the axial current normalization constant in  $o(a)$  improved lattice qcd*, Nucl. Phys. **B491** (1997), 344–364.
- [16] Martin Luscher, Rainer Sommer, Peter Weisz, and Ulli Wolff, *A precise determination of the running coupling in the  $su(3)$  yang-mills theory*, Nucl. Phys. **B413** (1994), 481–502.
- [17] I. Montvay and G. Münster, *Quantum fields on a lattice*, Cambridge, UK: Univ. Pr., 1994, Cambridge, UK: Univ. Pr. (1994) 491 p. (Cambridge monographs on mathematical physics).
- [18] Michael Edward Peskin and Daniel V. Schroeder, *An introduction to quantum field theory*, Reading, USA: Addison-Wesley (1995) 842 p.
- [19] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery, *Numerical recipes in c: The art of scientific computing*, Cambridge University Press, New York, NY, USA, 1992.
- [20] Stefan Sint, *On the schrodinger functional in qcd*, Nucl. Phys. **B421** (1994), 135–158.
- [21] Alan D. Sokal, *Monte carlo mehtods in statistical mechanics: Foundations and new algorithms*, Given at the Troisieme Cycle de la Physique en Suisse Romande, Lausanne, Switzerland, Jun 15-29, 1989.
- [22] Rainer Sommer, *Non-perturbative qcd: Renormalization,  $o(a)$ -improvement and matching to heavy quark effective theory*, (2006).
- [23] K. Symanzik, *Schrodinger representation and casimir effect in renormalizable quantum field theory*, Nucl. Phys. **B190** (1981), 1.
- [24] Kenneth G. Wilson, *Confinement of quarks*, Phys. Rev. D **10** (1974), no. 8, 2445–2459.
- [25] Ulli Wolff, *Monte carlo errors with less errors*, Comput. Phys. Commun. **156** (2004), 143–153.
- [26] W. M. Yao et al., *Review of particle physics*, J. Phys. **G33** (2006), 1–1232.