# Nichtperturbative Quarkmassenrenormierung mit zwei dynamischen Quarkflavours

vorgelegt von

Felix Tobias Bahr

8. Februar 2011

Diplomarbeit





Im Vergleich zu der am 8. Februar 2011 im Prüfungsamt eingereichten Arbeit sind in dieser korrigierten Version dieser Arbeit einige kleine Fehler behoben worden. Gleichung (C.1) wurde berichtigt; die sich daraus ergebenden geringfügigen, numerischen Änderungen sind an den entsprechenden Stellen korrigiert worden. Die Fehlerrechnung des Wertes in Gleichung (5.23) wurde ebenfalls überarbeitet. "An den Hochschulen jener Vorzeit hat es zu gewissen Zeiten von jungen faustischen Naturen geradezu gewimmelt, welche mit vollen Segeln aufs hohe Meer der Wissenschaften und der akademischen Freiheit fuhren und alle Schiffbrüche eines ungezügelten Dilettantismus erleiden mussten..." - Hermann Hesse, "Das Glasperlenspiel"

# Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis 3							
1	Quarkmassenrenormierung						
	1.1	Das Standardmodell der Elementarteilchenphysik	5				
	1.2	Idee der Renormierung	8				
	1.3	Renormierungsfaktor	10				
	1.4	Skalenevolution	12				
	1.5	Die Step-Scaling-Funktion	14				
2	Quantenchromodynamik auf dem Gitter						
	2.1	Yang-Mills-Theorie auf dem Gitter	16				
	2.2	Fermionen auf dem Gitter	17				
	2.3	Die Effektive Theorie nach Symanzik	19				
	2.4	O(a)-Verbesserung	21				
	2.5	PCAC-Relation	22				
3	Das Schrödinger-Funktional						
	3.1	Definition	24				
	3.2	Quantenmechanische Interpretation	25				
	3.3	Das Hintergrundfeld	27				
	3.4	Die renormierte Kopplung	27				
	3.5	Quarks	28				
	3.6	Korrelationsfunktionen	29				
	3.7	Gitterformulierung	31				
	3.8	O(a)-Verbesserung im Schrödinger-Funktional	33				
4	Die	Die laufende Quarkmasse und ihre Zwei-Schleifen anomale Dimension					
	4.1	Die Callan-Symanzik-Gleichung und die RGI-Parameter	35				
	4.2	Berechnung von $d_1^{SF}$	36				
	4.3	Bestimmung von $Z_{AP}^{(1)}$	39				

5	Bestimmung von Z <sub>M</sub> 42							
	5.1	Rekursion für $u_k$	43					
	5.2	Der Integralteil	44					
	5.3	Der Step-Scaling-Teil	46					
	5.4	Bestimmung von $Z_{AP}(g_0, \mu)$ und $Z_M$	50					
	5.5	Zusammenfassung und Ausblick	55					
Ar	hang	3	59					
A	Nota	ationen	60					
	A.1	Dirac-Matrizen	60					
	A.2	Generatoren der SU(3) $\ldots$	61					
в	Details zur numerischen Analyse							
	B.1	Struktur der Daten	63					
	B.2	Berechnung von $Z_{AP}$ und $\Sigma_{AP}$	65					
	B.3	Das Jackknife-Verfahren	67					
	B.4	Werte für $c$ und $\tilde{c}$	67					
С	Fehlerrechnung		69					
	C.1	Fehlerrechnung für $u_k$	69					
	C.2	Fehlerrechnung für $M/\overline{m}(1/L_{max})$	72					
Lit	Literaturverzeichnis							
Da	Danksagung							
Se	Selbstständigkeitserklärung							

# 1 Quarkmassenrenormierung

### 1.1 Das Standardmodell der Elementarteilchenphysik

Eine der fundamentalen Fragestellungen der Menschheit ist die nach dem Aufbau und dem Zusammenhalt der Materie, aus der das Universum, unsere Erde, und nicht zuletzt auch Lebewesen wie der Mensch bestehen. Der erste überlieferte systematische Versuch einer Antwort auf diese Frage wurde schon vor rund 2500 Jahren von Leukipp und seinem Schüler Demokrit formuliert, aus deren Überlegungen der Atomismus entstand, die Theorie also, dernach die Materie aus unteilbaren Grundbausteinen, den Atomen, bestehe. Wie wir heute wissen, ist dieses Modell dahingehend zu erweitern, dass Atome eine Substruktur besitzen, also nicht elementar sind: Sie haben einen positiv geladenen Kern, um den herum sich negativ geladene Elektronen bewegen. Der Atomkern besteht aus Protonen und Neutronen, die ihrerseits wiederum eine Substruktur besitzen; sie sind aus Quarks aufgebaut. Insgesamt sind sechs verschiedene Quarks bekannt, die in drei Familien oder Generationen klassifiziert werden können. Das bereits erwähnte Elektron ist der prominenteste Vertreter einer weiteren Gruppe von Elementarteilchen, den Leptonen. Auch hiervon sind sechs verschiedene bekannt, die sich ebenfalls in drei Familien einteilen lassen. Quarks und Leptonen werden im Standardmodell der Elementarteilchen zusammengefasst und mathematisch beschrieben. Quarks wechselwirken unter anderem über die starke Wechselwirkung, eine der vier fundamentalen Naturkräfte. Ihre Wirkung wird in der Quantenchromodynamik (QCD) beschrieben. Ein Überblick über die sechs bekannten Quarks und einige ihrer Eigenschaften ist in Tabelle 1.1 gegeben.

Die QCD ist eine skalenabhängige Theorie, das bedeutet, dass die Kopplung, also die Stärke der Wechselwirkung, und die Quarkmassen von der Energie abhängen, bei denen man einen Vorgang untersucht. Bei hohen Energien jenseits von  $\mu = 10$  GeV, das heißt geringem Abstand zueinander, ist die Kopplung zwischen den einzelnen Quarks schwach: Sie können sich also auf Längenskalen kleiner der Größe eines Hadrons fast wie freie Teilchen bewegen; für asymptotisch hohe Energien verhalten sie sich wie freie Teilchen. Man spricht daher auch von *asymptotic freedom* der Quarks. Bei

	1. Generation	2. Generation	3. Generation
Quark	up	charm	top
Ladung/e	2/3	2/3	2/3
Masse/MeV	1.7-3.3	1180-1340	169800-174200
Quark	down	strange	bottom
Ladung/e	-1/3	-1/3	-1/3
Masse/MeV	4.1-5.8	80-130	4130-4370

 Tabelle 1.1: Übersicht über die sechs verschiedenen Quarks, ihre Ladungen und Massen
 [1], unterteilt in drei Generationen. Die Massen der Quarks sind im MS-Renormierungsschema angegeben; die der drei leichten Quarks up, down, strange bei 2 GeV, die der drei schweren bei der Energie ihrer jeweiligen Massen.

niedrigen Energien im MeV-Bereich wird die Kopplung groß: Die Quarks sind zu Hadronen gebunden. Anschaulich betrachtet können die Quarks sich auf Längenskalen jenseits der Größe eines Hadrons nicht mehr frei bewegen, es kann also keine einzelnen, sondern immer nur gebundene Quarks geben. Den Umstand, dass die Quarks in den Hadronen "eingesperrt" sind, nennt man daher auch *confinement*.

Für die vollständige Beschreibung der QCD ist es also notwendig, sowohl den Niederenergie- als auch den Hochenergiebereich zu erfassen. Im Hochenergiebereich, bei geringer Kopplung, bietet die Störungstheorie eine gute Beschreibung der QCD: Eine Potenzreihenentwicklung im Kopplungsparameter liefert gute Resultate. Im Niederenergiebereich jedoch wird die Kopplung zu groß, als dass eine Störungsrechnung durchführbar wäre; es bedarf also einer nichtperturbativen Methode, mit der in der QCD für niedrige Energien gerechnet werden kann. Eine solche Methode ist die Gitter-QCD. In dieser Arbeit werden Ergebnisse aus Gitter-QCD-Rechnungen verwendet, um den Quarkmassenrenormierungsparameter zu bestimmen, welcher das Laufen der Quarkmasse mit der Energie beschreibt, beginnend im Bereich niedriger Energie bis in den Hochenergiebereich, in dem dann eine störungstheoretische Rechnung angesetzt werden kann.

Diese Arbeit ist wie folgt aufgebaut. Im ersten Kapitel soll zunächst die Idee der Renormierung vorgestellt und eine Motivation für die im Folgenden verwendeten Rechenmethoden wie die Gitterregularisierung geliefert werden. Dabei soll verdeutlicht werden, welche Techniken zur Beschreibung der Renormierung der QCD verwendet werden, also wie die Kopplung und die Masse sich in der QCD mit der Energieskala ändern, welche Strategien für die Berechnung dieser Skalenevolution zur Verfügung stehen und wie der Quarkmassenrenormierungsparameter berechnet werden kann.

Im zweiten Kapitel sollen dann einige Grundlagen der QCD auf dem Gitter ausgeführt werden. Dazu wird zunächst beleuchtet, wie man eine reine Eichtheorie auf das Gitter überträgt und dann, wie auch Quarks hinzugenommen werden können. Da durch die Diskretisierung einer Theorie in Form eines Gitters sogenannte Gitterartefakte entstehen können, wird dann angedeutet, wie diese Artefakte bis zur ersten Ordnung in der Gittergröße vermieden werden können. Schließlich wird die Definition einer Quarkmasse über die PCAC-Relation motiviert.

Im dritten Kapitel wird das Schrödinger-Funktional (SF) eingeführt, ein Schema, in dem zu rechnen es sich für die Behandlung skalenabhängiger Renormierungsprobleme als vorteilhaft herausgestellt hat. Auch hier wird zuerst die reine Eichtheorie und dann eine Theorie mit Quarks eingeführt. Dann werden Korrelationsfunktionen im SF definiert, die im weiteren Verlauf der Arbeit zur Berechnung verschiedener Koeffizienten verwendet werden. Schließlich wird auch das SF auf das Gitter übertragen.

Das vierte Kapitel widmet sich der Berechnung der Zwei-Schleifen anomalen Dimension der laufenden Quarkmasse. Die in dieser Arbeit berechneten Größen entstammen nichtperturbativen Gitterrechnungen. Um diese im Hochenergiebereich durch störungstheroretische Rechnungen fortsetzen zu können, dabei aber in den nichtperturbativen Gitterrechnungen den Einfluss der Störungstheorie so gering wie möglich zu halten, ist eine hohe numerische Genauigkeit erforderlich. Mittels der Zwei-Schleifen anomalen Dimension der laufenden Quarkmasse kann nun eine solche höhere Genauigkeit erzielt werden, und damit der Einfluss der Störungstheorie kontrolliert werden.

Die eigentliche numerische Berechnung des Quarkmassenrenormierungsparameters erfolgt im fünften Kapitel. Hier werden dann neben den verwendeten Verfahren auch numerische Ergebnisse präsentiert, um mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick zu schließen.

Im Anhang schließlich werden neben sperrigen Tabellen und technischen Gleichungen auch einige Details zu den numerischen Rechnungen mit dem verwendeten Datensatz und die Fehlerrechnung der berechneten Größen angefügt.

#### 1.2 Idee der Renormierung

Die Lagrange-Dichte der QCD für N<sub>f</sub> Quarkflavours lautet [2]

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{f}}} \overline{\psi}^{i} \left( i \gamma^{\mu} D_{\mu} - m_{i} \right) \psi^{i} - \frac{1}{4} F^{a}_{\mu\nu} F^{a\mu\nu}.$$
(1.1)

 $D_{\mu}$ ,  $F_{\mu\nu}^{a}$  sowie einige Eigenschaften der SU(3)-Eichgruppe sind in Abschnitt A.2 zusammengetragen. Die hier auftretende Masse *m* und Kopplung *g* werden als "nackte" Parameter bezeichnet. Rechnungen mit diesen nackten Parametern führen zu unphysikalischen Unendlichkeiten. Die Problematik der Renormierung gründet darauf, diese Unendlichkeiten zu beseitigen, sodass die physikalischen Größen berechnet werden können. Durch den Prozess der Renormierung werden die Unendlichkeiten in den nackten Parametern absorbiert. Durch diesen Vorgang erhalten die Parameter eine Skalenabhängigkeit: Die renormierte Quarkmasse  $m_{\rm R}$  und Kopplung  $g_{\rm R}$  hängen von der Energieskala ab. Diese Abhängigkeit der Quarkmasse und der Kopplung von der Energieskala wird auch experimentell festgestellt. Das Ziel ist es dann, den Renormierungsvorgang mathematisch zu beschreiben.

Die Strategie zur nichtperturbativen Lösung skalenabhängiger Renormierungsprobleme geht auf [3] zurück und wird in [4, 5] ausführlich diskutiert. In Abbildung 1.1 ist die Idee schematisch dargestellt. Das Ziel ist es, eine Beschreibung der QCD im gesamten Energiespektrum zu liefern, angefangen also im niederenergetischen Bereich, in dem die Quarks zu Hadronen gebunden sind (*confinement*), bis zum hochenergetischen Bereich, in dem die Quarks asymptotisch frei sind (*asymptotic freedom*). Dann können die Renormierungsgruppeninvarianten (RGI) als die Limesgrößen unendlicher Energie berechnet werden. Eine mathematische Definition der RGI wird in Abschnitt 1.3 vorgenommen. Durch den Vorgang der Renormierung erhalten die Parameter gund m eine Abhängigkeit vom verwendeten Renormierungsschema. Mittels der Limesbildung hin zun den RGI kann die Abhängigkeit vom verwendeten Renormierungsschema beseitigt werden: Die RGI-Parameter sind also unabhängig vom Renormierungsschema. Sie können daher als fundamentale Parameter der QCD angesehen werden, durch welche diese beschrieben werden kann.

Der hadronische Bereich liegt im Bereich von einigen 100 MeV. Hier ist eine störungstheoretsiche Rechnung nicht möglich, da die laufende Kopplung, der Expansionsparameter, hier von der Größenordnung 1 ist. Um nun, beginnend im hadronischen Niederenergiebereich, eine Skalenevolution zu den RGI zu formulieren, ist zunächst eine nichtperturbative Evolutionstechnik vonnöten, um von dem hadronischen in den



Abbildung 1.1: Strategie der Renormierung: Beginnend im hadronischen MeV-Bereich muss eine nichtperturbative Skalenevolution durchgeführt werden, bis der Hochenergiebereich bei etwa  $\sim 100$  GeV erreicht ist. Von hier aus können dann die RGI in einer störungstheoretischen Rechnung bestimmt werden.

perturbativen Sektor zu gelangen (Pfeil 1 in Abbildung 1.1). Von hier aus kann dann in einer perturbativen Rechnung die Gitterrechnung fortgesetzt werden, da im Bereich von einigen 10 GeV die Störungstheorie gut genug ist, um den Fehler gegenüber dem der Gitterrechnung vernachlässigbar klein zu halten. In einer solchen perturbativen Rechnung können dann die RGI-Parameter bestimmt werden (Pfeil 2). Diese sind unabhängig von der Energieskala und können daher als fundamentale Parameter der QCD angesehen werden. Physikalische Observable, zum Beispiel Quarkmassen, sind immer nur bei einer bestimmten Energieskala definiert. Als Referenzskala kann zum Beispiel 2 GeV genommen werden. Ausgehend vom RGI-Parameter kann dann in einer perturbativen Rechnung die entsprechende Observable bei dieser Referenzskala berechnet werden (Pfeil 3).

Um eine solche nichtperturbative Skalenevolution zu bewerkstelligen, sollten folgende Bedingungen gegeben sein [5]. Soll auf einem Gitter der Größe *L* gerechnet werden, so sollte *L* groß sein gegenüber den simulierten Größen, also zum Beispiel der Hadronmassen, um zu vermeiden, dass unerwünschte Effekte aufgrund der endlichen Größe des Gitters auftreten. Das Gitter sollte also deutlich größer als die darauf simulierten Energieskalen sein. Weiterhin soll, wie oben beschrieben, die Skalenevolution weit genug in den perturbativen Bereich bei einer Energieskala  $\mu \sim 10$  GeV vordringen, damit von dort aus eine Störungsrechnung mit kontrolliertem Fehler angesetzt und der Anschluss an andere Renormierungsschemata durchgeführt werden kann; dabei sollte aber die Auflösung des Gitters fein genug sein, um Diskretisierungseffekte zu vermeiden. Der Gitterabstand *a* muss also deutlich kleiner sein als die betrachteten Energieskalen  $\mu$ . Diese Bedingungen werden in der Ungleichung

$$L \gg \frac{1}{\sim 100 \,\mathrm{MeV}} \gg \frac{1}{\mu} \sim \frac{1}{\sim 10 \,\mathrm{GeV}} \gg a \tag{1.2}$$

zusammengefasst. Um dieser Ungleichung Rechnung zu tragen, müsste in einer Monte-Carlo-Rechnung ein  $N^4$ -Gitter mit  $N = L/a \gg 70$  simuliert werden; allein eine solche Simulation übersteigt die heute praktikabel zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten. Ein Ausweg aus dieser Zwickmühle wurde glücklicherweise bereits gefunden [3]. Dabei werden die Effekte, die durch die endliche Größe des Gitters hervorgerufen werden, selbst als physikalische Observable betrachtet. Die beiden physikalischen Skalen in der Ungleichung (1.2), *L* und  $\mu$ , werden dazu über die folgende Relation miteinander verknüpft,

$$\mu = 1/L. \tag{1.3}$$

Die Evolution der laufenden Kopplung mit der Energieskala  $\mu$  kann dann schrittweise untersucht werden, indem  $\mu$  in jedem Schritt um einen konstanten Faktor erhöht wird.

In Abschnitt 1.5 soll nun eine solche nichtperturbative Evolutionstechnik (Pfeil 1 in Abbildung 1.1), die Step-Scaling-Funktion, beschrieben werden. In Kapitel 5 wird dann mittels dieser nichtperturbativen Evolution und einer anschließenden störungstheoretischen Fortsetzung der Rechnung (Pfeil 2) der RGI-Faktor berechnet.

#### 1.3 Renormierungsfaktor

Die Vorgehensweise zur Bestimmung des Quarkmassenrenormierungsfaktors folgt zunächst einer Strategie der ALPHA-Kollaboration [6, 7] und [8], in dem das Verfahren zur Renormierung der Kopplung verwendet wurde. Die bereits in Abschnitt 1.2 erwähnten Renormierungsgruppeninvarinaten, die RGI-Masse M sowie der  $\Lambda$ -Parameter der QCD, sind als

$$\Lambda = \mu (b_0 \overline{g}^2)^{-b_1/2b_0^2} \exp\left\{-\frac{1}{2b_0 \overline{g}^2}\right\} \exp\left\{-\int_0^{\overline{g}} dx \left[\frac{1}{\beta(x)} + \frac{1}{b_0 x^3} - \frac{b_1}{b_0^2 x}\right]\right\}, \quad (1.4a)$$

$$M_{i} = \overline{m}_{i}(2b_{0}\overline{g}^{2})^{-d_{0}/2b_{0}} \exp\left\{-\int_{0}^{g} \mathrm{d}x \left[\frac{\tau(x)}{\beta(x)} - \frac{d_{0}}{b_{0}x}\right]\right\}$$
(1.4b)

definiert. Eine genaue Beschreibung der hier auftretenden Parameter wird in Kapitel 4 besprochen. Nun lässt sich die RGI-Masse M mit der Quarkmasse m, die in Abschnitt

2.5 über die PCAC-Relation definiert wird, über folgende Relation verknüpfen:

$$M_i = Z_{\rm M}(g_0)m_i(g_0), \quad i = 1, \dots, N_{\rm f}.$$
 (1.5)

Dabei ist  $Z_M$  der Quarkmassenrenormierungsfaktor. Die laufende Quarkmasse kann ferner geschrieben werden als

$$\overline{m}_{i}(\mu) = \frac{Z_{\rm A}(g_{0})}{Z_{\rm P}(g_{0},\mu)} m_{i}(g_{0}), \tag{1.6}$$

dabei werden  $Z_A$  und  $Z_P$  in Gleichungen (3.43) mathematisch definiert. Setzt man nun  $m_i(g_0)$  aus Gleichung (1.6) in Gleichung (1.5) ein, erhält man

$$Z_{\rm M}(g_0) = \frac{M}{\overline{m}(\mu)} \times \frac{Z_{\rm A}(g_0)}{Z_{\rm P}(g_0,\mu)}.$$
(1.7)

Hier ist zu beachten, dass die Terme  $Z_A$  und  $Z_P$  bei Verwendung von Wilson-Fermionen, Abschnitt 2.2, und in einer O(a)-verbesserten Theorie, Abschnitt 2.4, einer additiven Renormierung der Form

$$Z_{A,P}(1+b_{A,P}am_q) \tag{1.8}$$

bedürfen [9]. Die Effekte dieser zusätzlichen Terme sind auch nichtperturbativ bekannt [10], jedoch für Rechnungen mit leichten Quarks vernachlässigbar klein [6, 10, 11], sodass sie nicht weiter betrachtet werden und im Weiteren mit der Form (1.7) gearbeitet wird, vergleiche (3.46a).

 $Z_{M}(g_{0})$  wird hier also in zwei Faktoren aufgeteilt, die separat voneinander berechnet werden können. Dabei ist der erste Faktor,  $M/\overline{m}(\mu)$ , universell, das heißt, er ist unabhängig von der verwendeten Regularisierung. Der zweite Faktor kann nach Gleichung (1.6) als

$$\frac{Z_{\rm A}(g_0)}{Z_{\rm P}(g_0,\mu)} = \frac{\overline{m}_i(\mu)}{m_i(g_0)}$$
(1.9)

geschrieben werden und entspricht der Berechnung von  $\overline{m}/m(g_0)$  bei der Energieskala  $\mu$ . Dieser Term ist nicht universell; er hängt ab von der verwendeten Gitterregularisierung, also zum Beispiel der Wirkung und der nackten Kopplung, und ist somit nur für diese gültig.

In Gleichung (1.7) ist festzustellen, dass  $Z_A(g_0)$  keine Skalenabhängigkeit besitzt, weil es über chirale Ward-Identitäten bestimmt werden kann und damit unabhängig von der Energieskala  $\mu$  ist. Dieses ist in der Vorgehensweise von [6, 7] durchgeführt worden. Lediglich  $Z_P(g_0, \mu)$  hängt von der Energieskala  $\mu$  ab. Die skalenabhängige Berechnung von  $Z_P(g_0, \mu)$  erfolgt unabhängig davon. Das Verhältnis  $Z_A(g_0)/Z_P(g_0, \mu)$ kann dann anschließend gebildet werden. Davon soll in dieser Arbeit dergestalt abgewichen werden, dass dieses Verhältnis als *ein* Ausdruck berechnet wird, dass also nicht  $Z_A(g_0)$  und  $Z_P(g_0, \mu)$  separat, sondern direkt

$$Z_{\rm AP}(g_0,\mu) = \frac{Z_{\rm A}(g_0)}{Z_{\rm P}(g_0,\mu)}$$
(1.10)

über *eine* Renormierungsbedingung bestimmt wird, vergleiche Gleichung (3.46). Die Vorgehensweise bei der Berechnung von  $Z_{AP}(g_0, \mu)$  ist dabei analog zu der von  $Z_P(g_0, \mu)$  in der Literatur [6, 7].

## 1.4 Skalenevolution

Die Auswertung des Faktors  $M/\overline{m}(\mu)$  in Gleichung (1.7) kann nun allerdings nicht unmittelbar durchgeführt werden. Da die betrachteten Größen sich im nichtperturbativen, niederenergetischen Regime ( $\mu = \mu_{low}$ ) befinden, ist eine störungstheoretische Rechnung nicht anwendbar. Die Rechnung erfolgt dazu auf dem Gitter, damit eine Beschreibung im hadronischen Sektor möglich wird, vergleiche Abbildung 1.1. Es kann aber nun zur Berechung von  $M/\overline{m}(\mu_{low})$  mit

$$1 = \frac{\overline{m}(\mu_{\text{high}})}{\overline{m}(\mu_{\text{high}})} \tag{1.11}$$

multipliziert werden, also

$$\frac{M}{\overline{m}(\mu_{\text{low}})} = \frac{M}{\overline{m}(\mu_{\text{high}})} \times \frac{\overline{m}(\mu_{\text{high}})}{\overline{m}(\mu_{\text{low}})}.$$
(1.12)

Der erste Teil von Gleichung (1.12),  $M/\overline{m}(\mu_{high})$ , liegt nun im hochenergetischen Bereich und kann also störungstheoretisch berechnet werden (Pfeil 2 in Abbildung 1.1). Diese Berechnung ist in Kapitel 5 ausgeführt. Der zweite Teil von Gleichung (1.12),  $\overline{m}(\mu_{high})/\overline{m}(\mu_{low})$ , entspricht einer Skalenevolution der Quarkmasse zwischen zwei Energieskalen  $\mu_{low}$  und  $\mu_{high}$ . Diese Skalenevolution vom niederenergetischen in einen höherenergetischen Bereich muss nun solange nichtperturbativ erfolgen (Pfeil 1 in Abbildung 1.1), bis die erreichte Energieskala eine perturbative Fortsetzung der Rechnung mit vernachlässigbarem perturbativen Faktor erlaubt: Hier setzt dann der erste Teil von (1.12) ein. Diese Vorgehensweise entspricht genau der in Abbildung 1.1 angedeuteten.

In natürlichen Einheiten der Feldtheorie,

$$\hbar = c = 1, \tag{1.13}$$

kann eine Verbindung zwischen Längen und Energien hergestellt werden, derart, dass große Längen kleinen Energien entsprechen und umgekehrt, vergleiche Gleichung (1.3). Das bedeutet also für eine Gitterrechnung mit einer maximalen Gittergröße  $L_{max}$ 

$$1/L_{\rm max} \sim \mu_{\rm low}.\tag{1.14}$$

Damit können nun in Gleichung (1.12) analog zu (1.11) Einsmultiplikationen eingschoben werden, sodass eine Zerlegung in Verhältnisse entsteht, die den entsprechende Energiebereich abdecken. Es ist damit

$$\frac{M}{\overline{m}(\mu_{\text{low}})} = \frac{M}{\overline{m}(1/L_{\text{max}})}$$

$$= \frac{M}{\overline{m}(2/L_{\text{max}})} \times \frac{\overline{m}(2/L_{\text{max}})}{\overline{m}(1/L_{\text{max}})}$$

$$= \frac{M}{\overline{m}(4/L_{\text{max}})} \times \frac{\overline{m}(4/L_{\text{max}})}{\overline{m}(2/L_{\text{max}})} \times \frac{\overline{m}(2/L_{\text{max}})}{\overline{m}(1/L_{\text{max}})}$$

$$= \frac{M}{\overline{m}(2^{k}/L_{\text{max}})} \times \prod_{i=1}^{k} \frac{\overline{m}(2^{i}/L_{\text{max}})}{\overline{m}(2^{i-1}/L_{\text{max}})}$$
(1.15a)

$$=\frac{M}{\overline{m}(1/L_k)}\times w_k^{-1},\tag{1.15b}$$

wobei im Umformungsschritt zu Gleichung (1.15a) die Verallgemeinerung auf k solcher Einseinschübe (1.11) durchgeführt und im Schritt zu (1.15b) unter Verwendung von

$$L_k = 2^{-k} L_{\max} \tag{1.16}$$

die Schreibweise [6]

$$w_{k} = \prod_{i=1}^{k} \frac{\overline{m}(2^{i}/L_{\max})}{\overline{m}(2^{i-1}/L_{\max})}$$
(1.17a)

$$=\frac{\overline{m}(1/L_{\max})}{\overline{m}(1/L_k)}$$
(1.17b)

$$w_0 = 1,$$
 (1.18a)

$$L_0 \equiv L_{\max} \tag{1.18b}$$

verwendet wurde.

Das Prinzip dieser nichtperturbativen Skalenevolution zwischen zwei Energieskalen, also die Berechnung des Faktors  $w_k$ , wird im nächsten Abschnitt besprochen.

## 1.5 Die Step-Scaling-Funktion

Gesucht ist nun eine Strategie zur Berechnung des Ausdrucks  $\overline{m}(\mu_{\text{high}})/\overline{m}(\mu_{\text{low}})$ . Mit Gleichung (1.6) und der Notation (1.10) kann dieser umgeschrieben werden zu

$$\frac{\overline{m}(\mu_{\text{high}})}{\overline{m}(\mu_{\text{low}})} = \frac{Z_{\text{AP}}(\mu_{\text{high}})}{Z_{\text{AP}}(\mu_{\text{low}})}.$$
(1.19)

Man definiert hierzu die sogenannte Step-Scaling-Funktion, die eine *diskrete* Skalenevolution ermöglicht. Das heißt, dass man eine Größe zunächst bei einer niedrigen Energie und dann bei einer höheren Energie berechnet, um aus dem Verhältnis der beiden die Skalenevolution der Größe zu gewinnen. Dieser Prozess kann dann solange wiederholt werden, bis die gewünschte Skalenevolution über einen weiten Energiebereich gefunden worden ist.

Beginnend bei einer gegebenen Kopplung [5]

$$u_0 = \overline{g}^2 (1/L_{\text{max}}) \tag{1.20}$$

ist nun

$$\overline{g}^2(1/L_1) = u_1, \quad L_1 = sL,$$
 (1.21)

wobei *s* ein Skalierungsfaktor ist. Typischerweise und im Folgenden wird s = 2 gewählt. Für Gitterrechnungen bedeutet dies nun konkret, dass man die zu untersuchende Größe zunächst auf einem Gitter der Größe *L* simuliert. Dann wiederholt man die Simulation bei gleichbleibender Kopplung  $u = \overline{g}^2$  auf einem Gitter der Größe 2*L*, Abbildung 1.2.



Abbildung 1.2: Schematische Darstellung der Step-Scaling-Funktion. Für ein Gitter fester Größe wählt man eine Gitterauflösung a/L, zum Beispiel L = 4, links. Dann verdoppelt man die Größe des Gitters bei gleichbleibender Auflösung und kann daraus  $\Sigma(u, a/L)$  berechnen. Wiederholt man dies für verschiedene Gitterauflösungen, zum Beispiel L = 6, rechts, kann gemäß Gleichung (1.23) zum Kontinuum extrapoliert werden.

Man definiert damit die Step-Scaling-Funktion

$$\Sigma_{\rm AP}(u,a/L) = \left. \frac{Z_{\rm AP}(g_0,a/2L)}{Z_{\rm AP}(g_0,a/L)} \right|_{u=\overline{g}^2(L)}.$$
(1.22)

Berechnet man dieses  $\Sigma_{AP}(u, a/L)$  nun bei verschiedener Gitterauflösung a/L und fester Gittergröße, Abbildung 1.2, kann zum Kontinuum extrapoliert werden,

$$\sigma_{\rm AP} = \lim_{a \to 0} \Sigma_{\rm AP}(u, a/L). \tag{1.23}$$

Dieser Vorgang wird für verschiedene Kopplungen

$$u_k = \overline{g}^2(L_k), \tag{1.24a}$$

$$L_k = 2^{-k} L_{\max}, \tag{1.24b}$$

wiederholt. Details zu den so durchgeführten Rechnungen finden sich im Anhang B. Damit ist der zweite Faktor in Gleichung (1.12) bestimmt. Zur Berechnung der RGI-Masse muss nun also noch der erste Faktor in Gleichung (1.12) bestimmt werden. Dann kann der erste Faktor in Gleichung (1.7),  $M/\overline{m}(\mu_{\text{low}})$ , berechnet werden. Zur Bestimmung von  $Z_{\text{M}}$  ist dann noch die Bestimmung des zweiten Terms in Gleichung (1.7) vonnöten. Diese Rechnungen werden in Kapitel 5 ausgeführt. Im nächsten Kapitel sollen jedoch zunächst einige Grundzüge der QCD auf dem Gitter betrachtet werden.

## 2 Quantenchromodynamik auf dem Gitter

### 2.1 Yang-Mills-Theorie auf dem Gitter

Zunächst soll die reine Yang-Mills-Theorie auf dem Gitter betrachtet werden, also nur Eichfelder. Im nächsten Abschnitt werden dann Quarks auf dem Gitter untersucht. Um eine Quantenfeldtheorie (QFT) auf dem Gitter zu begründen, nimmt man die Raumzeit als ein vierdimensionales hyperkubisches Gitter mit einem Gitterabstand aan. Eine Gitter-QFT kann dann konstruiert werden, indem die Wirkung der zugehörigen euklidischen Kontinuumstheorie diskretisiert und auf das Gitter übertragen wird. Auf einem Gitter mit einer Gittergröße a definiert man einen Paralleltransporter vom Punkt x in  $\mu$ -Richtung durch [12]

$$U(b) \equiv U(x + a\hat{\mu}, x) \equiv U_{x\mu} \in SU(N).$$
(2.1)

Einen solchen elementaren Paralleltransporter, also die Verbindung zweier benachbarter Gitterpunkte, nennt man auch *Link*, vergleiche Abbildung 2.1. Die Eichfelder in der Gittertheorie werden durch solche Links ersetzt. Links sind Matrizen der fundamentalen Darstellung der zugrunde liegenden Eichgruppe, für die QCD also SU(3). Das Transformationsverhalten eines Links wird durch

$$U(x,y) \to \Lambda(x)U(x,y)\Lambda^{-1}(y) \tag{2.2}$$

beschrieben. Ein Link, der "vorwärts" betrachtet wird, und ein solcher, der "rückwärts" betrachtet wird, hängen über folgende Relation zusammen,

$$U(y,x) = U^{\dagger}(x,y) \equiv U^{-1}(x,y).$$
(2.3)

Ein beliebiger Weg C auf dem Gitter kann als Hintereinanderreihung von Links aufgefasst werden,

$$\mathcal{C} = b_n \circ \ldots \circ b_2 \circ b_1. \tag{2.4}$$

Das entsprechende Eichfeld ergibt sich dann als Produkt der einzelnen Links,

$$U(\mathcal{C}) = U(b_n) \dots U(b_1) \equiv \prod_{b \in \mathcal{C}} U(b).$$
(2.5)

Von besonderer Bedeutung sind jene Produkte von Links, die einen geschlossenen Weg beschreiben. Der kürzeste, nichttriviale, geschlossene Weg ist die *Plakette* [13], welche aus vier Links zusammengesetz ist, Abbildung 2.2,

$$U_{\mu\nu}(x) = U(x,\mu)U(x+a\hat{\mu},\nu)U(x+a\hat{\nu},\mu)^{-1}U(x,\nu)^{-1}.$$
(2.6)

K. Wilson [14] verwendete diese Plaketten, um eine Gittereichwirkung zu konstruieren,

$$S_{\rm G}[U] = \frac{1}{g_0^2} \sum_p \operatorname{Sp}\left\{1 - U(p)\right\},$$
(2.7)

wobei die Summe über alle orientierten Plaketten läuft, das bedeutet, dass jede Plakette nur in einer bestimmten Richtung durchlaufen werden soll und somit nur einmal zu der Summe beiträgt.



Abbildung 2.1: Graphische Veranschaulichung eines Links

Abbildung 2.2: Graphische Veranschaulichung einer Plakette

## 2.2 Fermionen auf dem Gitter

Um die vollständige QCD auf dem Gitter umzusetzen, genügt die Betrachtung reiner Eichfelder noch nicht. Ein wichtiger Bestandteil der QCD fehlt dazu noch, nämlich die Fermionen, also die Quarks. Die vollständige Wirkung der QCD,

$$S\left[U,\overline{\psi},\psi\right] = S_{\rm G}[U] + S_{\rm F}\left[U,\overline{\psi},\psi\right],\tag{2.8}$$

setzt sich zusammen aus der reinen Eichwirkung  $S_{\rm G}$  und der Fermionwirkung  $S_{\rm F}$ .

Ein einfacher Ansatz des Übertragens der Fermionwirkung auf das Gitter führt auf die naive Fermionwirkung,

$$S_{\text{F,naiv}}\left[U,\overline{\psi},\psi\right] = a^4 \sum_{x} \overline{\psi}(x) \left(D + m_0\right) \psi(x), \qquad (2.9)$$

wobei

$$D = \frac{1}{2} \left\{ \gamma_{\mu} (\nabla^*_{\mu} + \nabla_{\mu}) \right\}$$
(2.10)

der Dirac-Operator auf dem Gitter mit den Gitterableitungen

$$\nabla_{\mu}\psi(x) = \frac{1}{a} \left[ U(x,\mu)\psi(x+a\hat{\mu}) - \psi(x) \right],$$
(2.11a)

$$\nabla^*_{\mu}\psi(x) = \frac{1}{a} \left[ \psi(x) - U(x - a\hat{\mu}, \mu)^{-1}\psi(x - a\hat{\mu}) \right]$$
(2.11b)

ist. Diese Wirkung führt aber zum bekannten Problem der *Fermionverdopplung*: Der freie Propagator eines Fermions unter Verwendung dieser Wirkung [15],

$$\widetilde{D}(p)^{-1} = \frac{m\mathbb{1} - \mathrm{i}\,a^{-1}\sum_{\mu}\gamma_{\mu}\sin(p_{\mu}a)}{m^2 + a^{-2}\sum_{\mu}\sin(p_{\mu}a)^2},\tag{2.12}$$

hat nicht nur eine, wie für ein Teilchen sinnvoll, sondern 16 Polstellen, bei

$$p = (0, 0, 0, 0), (\pi/a, 0, 0, 0), \dots, (\pi/a, \pi/a, \pi/a, \pi/a).$$
(2.13)

Neben einem physikalischen Teilchen,  $p_{\mu} = 0$ , treten also 15 weitere, unphysikalische "Teilchen" auf. Aus diesem Problem führen mehrere Auswege [15]. Hier sollen jedoch nur die Wilson-Fermionen besprochen werden, die in den Rechnungen dieser Arbeit verwendet worden sind. Dazu macht man sich zunutze, dass man zum Dirac-Operator einen Term proportional zur Gittergröße *a* addieren kann, da dieser im Kontinuumslimes verschwindet, und daher das Kontinuum unverändert lässt. Die Addition des sogenannten Wilson-Terms,

$$a\nabla^*_{\mu}\nabla_{\mu}, \qquad (2.14)$$

eines Terms zweiter Ableitung, ändert den Dirac-Operator wie folgt,

$$D_{\rm W} = \frac{1}{2} \left\{ \gamma_{\mu} (\nabla^*_{\mu} + \nabla_{\mu}) - a \nabla^*_{\mu} \nabla_{\mu} \right\}.$$
(2.15)

Anhand des Dirac-Operators im Impulsraum nach Hinzunahme dieses Terms,

$$\widetilde{D}(p) = m\mathbb{1} + \frac{i}{a} \sum_{\mu=1}^{4} \gamma_{\mu} \sin(p_{\mu}a) + \mathbb{1} \frac{1}{a} \sum_{\mu=1}^{4} (1 - \cos(p_{\mu}a)),$$
(2.16)

wird deutlich, dass das Problem der Fermionverdopplung nun dadurch behoben wird. Den unphysikalischen "Teilchen" mit Komponenten  $p_{\mu} = \pi/a$  wird dadurch eine Masse

$$m + \frac{2l}{a} \tag{2.17}$$

zugewiesen. *l* ist dabei die Anzahl der Impulskomponenenten mit  $p_{\mu} = \pi/a$ . Im Kontinuumslimes  $a \rightarrow 0$  geht dieser Massenterm gegen unendlich, was die unphysikalischen Teilchen aus dem Spektrum verschwinden lässt. Daher verbleibt nur das physikalisch sinnvolle Teilchen mit  $p_{\mu} = 0$ . Der Dirac-Term bricht allerdings die chirale Symmetrie. Die Fermionwirkung ist dann gegeben durch

$$S_{\rm F}\left[U,\overline{\psi},\psi\right] = a^4 \sum_{x} \overline{\psi}(x) \left(D_{\rm W} + m_0\right) \psi(x). \tag{2.18}$$

#### 2.3 Die Effektive Theorie nach Symanzik

Nach Symanzik [16, 17] lässt sich die Gitter-QCD in der Nähe des Kontinuums als eine effektive Theorie mit der Wirkung

$$S_{\rm eff} = S_0 + aS_1 + a^2S_2 + \dots$$
 (2.19)

schreiben, wobei S<sub>0</sub> die Kontinuumswirkung ist und

$$S_k = \int \mathrm{d}^4 x \, \mathcal{L}_k(x), \tag{2.20}$$

wobei die Langrangians  $\mathcal{L}_k(x)$  Linearkombinationen lokaler Operatoren der Dimension 4 + k sind. Diese Dimension soll die nicht-negativen Potenzen der Quarkmasse beinhalten. Die exakten Symmetrien der Gittertheorie sollen ebenfalls erhalten wer-

den. Eine Basis für  $\mathcal{L}_1$  ist dann

$$\mathcal{O}_1 = \overline{\psi} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \psi, \qquad (2.21a)$$

$$\mathcal{O}_2 = \overline{\psi} D_\mu D_\mu \psi + \overline{\psi} D_\mu D_\mu \psi, \qquad (2.21b)$$

$$\mathcal{O}_3 = m \operatorname{Sp} \left\{ F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right\}, \qquad (2.21c)$$

$$\mathcal{O}_4 = m \left\{ \overline{\psi} \gamma_\mu D_\mu \psi - \overline{\psi} \overleftarrow{D_\mu} \gamma_\mu \psi \right\}, \qquad (2.21d)$$

$$\mathcal{O}_5 = m^2 \overline{\psi} \psi. \tag{2.21e}$$

Cutoff-Effekte stammen jedoch nicht nur von der Gitterwirkung, sondern auch von den lokalen Feldern. Für ein solches Feld  $\phi(x)$  sollten die *n*-Punkt-Korrelationsfunktionen

$$G_n(x_1,\ldots,x_n) = \left(Z_{\phi}\right)^n \left\langle \phi(x_1)\ldots\phi(x_n)\right\rangle_{\text{con}}$$
(2.22)

einen wohldefinierten Kontinuumslimes besitzen, wenn der Renormierungsfaktor  $Z_{\phi}$  geeignet gewählt ist und die Punkte  $x_1, \ldots, x_n$  in physikalischem Abstand zueinander gehalten werden. In der lokalen effektiven Theorie wird das renormierte Gitterfeld  $Z_{\phi}\phi(x)$  durch ein effektives Feld

$$\phi_{\text{eff}}(x) = \phi_0(x) + a\phi_1(x) + a^2\phi_2(x) + \dots$$
 (2.23)

ausgedrückt. Die  $\phi_k(x)$  sind dabei Felder mit geeigneten Symmetrien und Dimensionen. Für die Gitter-Korrelationsfunktion gilt dann bis zur Ordnung *a* 

$$G_n(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi_0(x_1) \dots \phi_0(x_n) \rangle_{\text{con}} - a \int d^4 y \, \langle \phi_0(x_1) \dots \phi_0(x_n) \mathcal{L}_1(y) \rangle_{\text{con}} + a \sum_{k=1}^n \, \langle \phi_0(x_1) \dots \phi_1(x_k) \dots \phi_0(x_n) \rangle_{\text{con}} + O(a^2),$$
(2.24)

wobei die Erwartungswerte  $\langle \rangle_{con}$  sich auf die Kontinuumswirkung  $S_0$  beziehen.

Von den fünf Termen in Gleichungen (2.21) können zwei,  $\mathcal{O}_2$  und  $\mathcal{O}_4$ , vernachlässigt werden, da sie sich mittels der Feldgleichungen als Linearkombinationen der anderen drei Terme schreiben lassen. Die Terme  $\mathcal{O}_3$  und  $\mathcal{O}_5$  bewirken eine Verschiebung der nackten Kopplung und der nackten Quarkmasse. Durch eine geeignete Reparametrisierung der nackten Parameter in der unverbesserten Theorie kann ihr Effekt also ausgeglichen werden. Zur O(a)-Verbesserung der Theorie verbleibt also der Term  $\mathcal{O}_1$ , Gleichung (2.21a). Die genaue Vorgehensweise wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

## **2.4** O(a)-Verbesserung

Um Gittereffekte zu reduzieren und so ein besseres Annähern an das Kontinuum zu ermöglichen, kann die Gitterwirkung verbessert werden. Eine Möglichkeit dazu besteht darin, zur Wirkung einen Term proportional zum Gitterabstand *a* zu addieren. Im Kontinuumslimes verschwindet ein solcher Term aufgrund der *a*-Abhängigkeit; die Kontinuumswirkung bleibt also erhalten. Auf dem Gitter jedoch können durch Addition dieses Terms O(a)-Effekte ausgeglichen werden, sodass das Kontinuum idealerweise mit  $O(a^2)$  erreicht wird. Der gängig verwendete O(a)-Gegenterm wurde in Abschnitt 2.3 motiviert. Sheikholeslami und Wohlert [18] benutzten ihn erstmals zur O(a)-Verbesserung,

$$\delta S\left[U,\overline{\psi},\psi\right] = a^5 \sum_{x} c_{\rm SW} \overline{\psi}(x) \frac{\mathrm{i}}{4} \sigma_{\mu\nu} \widehat{F}_{\mu\nu}(x) \psi(x); \qquad (2.25)$$

damit kann die verbesserte Wirkung geschrieben werden als

$$S_{\text{impr}}\left[U,\overline{\psi},\psi\right] = S\left[U,\overline{\psi},\psi\right] + \delta S\left[U,\overline{\psi},\psi\right].$$
(2.26)

Der Koeffizient  $c_{SW}$  kann als Reihenentwicklung in der Kopplung  $g_0^2$  geschrieben werden,

$$c_{\rm SW} = 1 + c_{\rm SW}^{(1)} g_0^2 + O(g_0^4);$$
(2.27)

c<sub>SW</sub> wurde störungstheoretisch von R. Wohlert [19] berechnet,

$$c_{\rm SW}^{(1)} = 0.26590(7),$$
 (2.28)

unabhängig von  $N_{\rm f}$ . Nichtperturbativ ist  $c_{\rm SW}$  bekannt für  $N_{\rm f}=0$  (quenched) [20], und für  $N_{\rm f}=2$  [21],

$$c_{\rm SW} = \frac{1 - 0.454g_0^2 - 0.175g_0^4 + 0.012g_0^6 + 0.045g_0^8}{1 - 0.720g_0^2}.$$
 (2.29)

Weiterhin ist  $\widehat{F}_{\mu\nu}(x)$  der Gitter-Feldstärketensor,

$$\widehat{F}_{\mu\nu}(x) = \frac{1}{8a^2} \left\{ Q_{\mu\nu}(x) - Q_{\nu\mu}(x) \right\}, \qquad (2.30)$$

mit

$$Q_{\mu\nu}(x) = U(x,\mu)U(x+a\hat{\mu},\nu)U(x+a\hat{\nu},\mu)^{-1}U(x,\nu)^{-1} + U(x,\nu)U(x-a\hat{\mu}+a\hat{\nu},\mu)^{-1}U(x-a\hat{\mu},\nu)^{-1}U(x-a\hat{\mu},\mu) + U(x-a\hat{\mu},\mu)^{-1}U(x-a\hat{\mu}-a\hat{\nu},\nu)^{-1}U(x-a\hat{\mu}-a\hat{\nu},\mu)U(x-a\hat{\nu},\nu) + U(x-a\hat{\nu},\nu)^{-1}U(x-a\hat{\nu},\mu)U(x+a\hat{\mu}-a\hat{\nu},\nu)U(x,\mu)^{-1}.$$
(2.31)

 $Q_{\mu\nu}(x)$  ist aus vier Elementarplaketten zusammengesetzt und wird wegen seiner graphischen Repräsentation auch *Kleeblattterm* (clover term) genannt, vergleiche Abbildung 2.3.



Abbildung 2.3: Graphische Darstellung des Kleeblattterms aus vier Elementarplaketten

## 2.5 PCAC-Relation

Der Axialstrom und die pseudoskalare Dichte,

$$A^{a}_{\mu}(x) = \overline{\psi}(x)\gamma_{\mu}\gamma_{5}\frac{1}{2}\tau^{a}\psi(x), \qquad (2.32a)$$

$$P^{a}(x) = \overline{\psi}(x)\gamma_{5}\frac{1}{2}\tau^{a}\psi(x)$$
(2.32b)

können als Ausgangspunkt zur Definition einer Masse in der Gitter-QCD genommen werden. Die masselose QCD besitzt chirale Symmetrie. Also ist der Axialstrom für m = 0 erhalten,

$$\left\langle \left(\partial_{\mu}A^{a}_{\mu}(x)\mathcal{O}\right)\right\rangle = 0.$$
 (2.33)

Die axiale Symmetrie wird jedoch durch die Quarkmassen gebrochen. Diesen Umstand kann man wiederum zur Definition einer Quarkmasse nutzen [22]; es kann die PCAC-Relation (*partial conservation of the axial current*) formuliert werden,

$$\left\langle \left(\partial_{\mu}A^{a}_{\mu}(x)\mathcal{O}\right)\right\rangle = 2m\left\langle P^{a}(x)\mathcal{O}\right\rangle,$$
(2.34)

nach der der Axialstrom für  $m \neq 0$  gerade nicht erhalten ist. Gleichung (2.34) kann dann zur Definition der Masse *m* genutzt werden,

$$m = \frac{\left\langle \left[ \partial_{\mu} A^{a}_{\mu}(x) \right] \mathcal{O}^{a} \right\rangle}{2 \left\langle P^{a}(x) \mathcal{O}^{a} \right\rangle}.$$
(2.35)

Ersetzt man auf dem Gitter die Ableitung durch die Gitterableitung

$$\tilde{\partial}_{\mu} = \frac{1}{2} \left( \partial_{\mu}^{*} + \partial_{\mu} \right), \qquad (2.36)$$

erhält man für die in Kapitel 1 bereits motivierten, renormierten Größen

$$\tilde{\partial}_{\mu}\left\langle \left(A_{\mathrm{R}}\right)_{\mu}^{a}\left(x\right)\mathcal{O}\right\rangle = 2m_{\mathrm{R}}\left\langle \left(P_{\mathrm{R}}\right)^{a}\left(x\right)\mathcal{O}\right\rangle,\tag{2.37}$$

vergleiche Gleichung (3.47).

# 3 Das Schrödinger-Funktional

In diesem Kapitel wird das Schrödinger-Funktional (SF) [23] besprochen, in dem die Rechnungen im Weiteren durchgeführt worden sind. Dazu wird zunächst das SF im Kontinuum eingeführt, zunächst dabei nur das reine Eichfeld. In Abschnitt 3.5 werden dann Quarks hinzugenommen. In Abschnitt 3.7 schließlich wird das SF auf das Gitter übertragen.

## 3.1 Definition



Abbildung 3.1: Graphische Veranschaulichung des Schrödinger-Funktionals

Man kann sich das Schrödinger-Funktional als einen vierdimensionalen Raumzeit-Zylinder vorstellen, an den in den drei Raumrichtungen,  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ , periodische und in Zeitrichtung,  $x_0$ , Dirichlet-Randbedingungen gestellt werden, Abbildung 3.1. Für die Vektorpotenziale bedeutet das also in der Zeit

$$A_k(x) = \begin{cases} C_k^{\Lambda}(\mathbf{x}) & \text{bei } x_0 = 0\\ C'_k(\mathbf{x}) & \text{bei } x_0 = L, \end{cases}$$
(3.1)

wobei C und C' klassische Eichpotenziale sind und

$$A_k^{\Lambda}(\mathbf{x}) = \Lambda(\mathbf{x})A_k(\mathbf{x})\Lambda(\mathbf{x})^{-1} + \Lambda(\mathbf{x})\partial_k\Lambda(\mathbf{x})^{-1}, \quad \Lambda \in \mathrm{SU}(N)$$
(3.2)

eine Eichtransformation von  $A_k$  ist. In den Raumrichtungen ist

$$A_k(x+L\hat{k}) = A_k(x), \quad \Lambda(\mathbf{x}+L\hat{k}) = \Lambda(\mathbf{x}).$$
(3.3)

Das Schrödinger-Funktional ist über die Zustandssumme

$$\mathcal{Z}[C',C] \equiv \int \mathcal{D}[A] \int \mathcal{D}[A] \, e^{-S_{\rm G}[A]} \tag{3.4}$$

mit diesen Randbedingungen definiert. Dabei sind

$$\mathbf{D}[A] = \prod_{\mathbf{x},\mu,a} \mathbf{d}A^a_{\mu}(\mathbf{x}),\tag{3.5a}$$

$$D[\Lambda] = \prod_{\mathbf{x}} d\Lambda(\mathbf{x}); \tag{3.5b}$$

 $d\Lambda(\mathbf{x})$  ist das Haar-Maß der SU(N). Die reine Eichwirkung ist durch

$$S_{\rm G}[A] = -\frac{1}{2g_0^2} \int d^4x \, \operatorname{Sp}\{F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}\}$$
(3.6)

gegeben, dabei ist

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu} + [A_{\mu}, A_{\nu}]$$
(3.7)

der Feldstärketensor. Das SF ist weiterhin ein eichinvariantes Funktional der Randfelder,

$$\mathcal{Z}[C^{\Omega'}, C^{\Omega}] = \mathcal{Z}[C', C]. \tag{3.8}$$

## 3.2 Quantenmechanische Interpretation

Quantenmechanisch interpretiert, beschreibt das Schrödinger-Funktional eine Übergangsamplitude von einem Zustand  $|C\rangle$  in einen Zustand  $|C'\rangle$  nach einer euklidischen Zeit *T*. In der Schrödinger-Darstellung sind die quantenmechanischen Zustände  $\Psi[A]$ Funktionale der Raumkomponenten der Vektorpotenziale  $A_k^a(\mathbf{x})$ . Die kanonisch konjugierten Feldvariablen sind durch Funktionalableitungen gegeben,

$$E_k^a(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathrm{i}} \frac{\delta}{\delta A_k^a(\mathbf{x})}.$$
(3.9)

Ein Skalarprodukt ist über

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle = \int \mathcal{D}[A] \Psi[A]^* \Psi'[A]$$
 (3.10)

mit

$$\mathbf{D}[A] = \prod_{\mathbf{x},k,a} \mathbf{d}A_k^a(\mathbf{x}) \tag{3.11}$$

definiert. Der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \int_{0}^{L} d^{3}x \left\{ \frac{g_{0}^{2}}{2} E_{k}^{a}(\mathbf{x}) E_{k}^{a}(\mathbf{x}) + \frac{1}{4g_{0}^{2}} F_{kl}^{a}(\mathbf{x}) F_{kl}^{a}(\mathbf{x}) \right\}$$
(3.12)

kommutiert mit dem Projektionsoperator

$$\mathcal{P}\Psi[A] = \int \mathcal{D}[\Lambda]\Psi[A^{\Lambda}], \qquad (3.13)$$

der  $\Psi[A]$  auf den physikalischen Unterraum des Hilbertraumes projiziert. Schreibt man weiterhin einen Zustand  $|C\rangle$  durch die klassischen Eichfelder,

$$\langle C | \Psi \rangle = \Psi[C],$$
 (3.14)

kann die quantenmechanische Formulierung des Schrödinger-Funktionals als

$$\mathcal{Z}[C',C] = \left\langle C' \middle| e^{-\mathcal{H}T} \mathcal{P} \middle| C \right\rangle$$
(3.15a)

$$=\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-E_n T} \Psi_n[C'] \Psi_n[C]^* \tag{3.15b}$$

geschrieben werden. Im Folgenden wird weiterhin

$$T = L \tag{3.16}$$

gesetzt.

## 3.3 Das Hintergrundfeld

In der SF-Formulierung kann die QCD in einem Farbhintergrundfeld betrachtet werden. Ist *B* eine Lösung der Bewegungsgleichungen mit den Randbedingungen (3.1), und gilt weiterhin für die Wirkung bezüglich *B* 

$$S[A] > S[B] \tag{3.17}$$

für alle Felder *A*, die sich nicht als Eichtransformationen  $B^{\Omega}$  von *B* darstellen lassen, so wird *B* als *Hintergrundfeld* bezeichnet, das von den Randbedingungen erzeugt wird. Wegen (3.17) dominieren für kleine Kopplungen  $g_0$  Felder in der Nähe von *B* im Pfadintegral. Für die effektive Wirkung

$$\Gamma[B] \equiv -\ln \mathcal{Z}[C', C] \tag{3.18}$$

kann dann eine perturbative Reihenentwicklung angesetzt werden,

$$\Gamma[B] = \frac{1}{g_0^2} \Gamma_0[B] + \Gamma_1[B] + g_0^2 \Gamma_2[B] + \dots, \qquad (3.19a)$$

$$\Gamma_0[B] \equiv g_0^2 S[B].$$
 (3.19b)

Hierbei macht man sich zunutze, dass *B* und *C*, *C'* bijektiv miteinander verknüpft sind, sodass *B* anstelle von *C*, *C'* als Argument von  $\Gamma$  genutzt werden kann.

## 3.4 Die renormierte Kopplung

Die einzige Längenskala im SF ist die Länge *L*. Zur Definition der laufenden Kopplung  $\overline{g}^2$  liegt es daher nahe, dass diese von *L* abhängt. Da die Feldstärke mit 1/*L* skaliert, empfiehlt es sich, einen dimensionslosen Parameter  $\eta$  einzuführen, von dem dann das Produkt *LB* der Länge *L* mit dem Hintergrundfeld *B* abhängt. Mit einem Hintergrundfeld wie in Abschnitt 3.3 ist die Ableitung

$$\Gamma'[B] = \frac{\partial}{\partial \eta} \Gamma[B] \tag{3.20}$$

auch nichtperturbativ festgelegt. Damit kann eine renormierte Kopplung als

$$\overline{g}^2(L) = \frac{\Gamma'_0[B]}{\Gamma'[B]}$$
(3.21)

27

eingeführt werden, welche nur von der einzigen Skala *L* abhängt. Anschaulich entspricht die Kopplung also der Antwort des Systems auf eine Veränderung der Randbedingungen. Wählt man für die SU(3)-Eichgruppe als Randbedingungen [24]

$$C_{k} = \frac{i}{L} \begin{pmatrix} \phi_{1} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{2} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{3} \end{pmatrix}, \quad C'_{k} = \frac{i}{L} \begin{pmatrix} \phi'_{1} & 0 & 0 \\ 0 & \phi'_{2} & 0 \\ 0 & 0 & \phi'_{3} \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (3.22)$$

mit

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \eta - \frac{\pi}{3}, & \phi_1' &= -\phi_1 - \frac{4\pi}{3}, \\
\phi_2 &= -\frac{1}{2}\eta, & \phi_2' &= -\phi_3 + \frac{2\pi}{3}, \\
\phi_3 &= -\frac{1}{2}\eta + \frac{\pi}{3}, & \phi_3' &= -\phi_2 + \frac{2\pi}{3},
\end{aligned}$$
(3.23)

wird dadurch ein abelsches Hintergrundfeld induziert, welches durch

$$B_0 = 0,$$
 (3.24a)

$$B_k = \left[ x_0 C'_k + (L - x_0) C_k \right] / L, \quad k = 1, 2, 3$$
(3.24b)

gegeben ist. Der zugehörige Feldtensor ist

$$G_{0k} = \partial_0 B_k = (C'_k - C_k)/L, \quad k = 1, 2, 3.$$
 (3.25)

#### 3.5 Quarks

Bisher wurde nur die Übertragung des reinen Yang-Mills-Eichfelds in das Schrödinger-Funktional betrachtet. Letztlich ist aber die vollständige QCD von Interesse. Dazu sollen nun auch Quarks im Schrödinger-Funktional betrachtet werden. Dies wurde zuerst von S. Sint [25] bewerkstelligt. Hier sollen die wesentlichen Resultate dieser Überlegungen zusammengefasst werden. Zunächst muss beachtet werden, dass die Dirac-Gleichung, eine Differentialgleichung erster Ordnung, eindeutig lösbar ist, wenn die Hälfte der Komponenten der fermionischen Felder auf dem Rand bestimmt ist. Die Fermionwirkung ist daher unter Verwendung der zeitlichen Projektionsoperatoren

$$P_{\pm} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \gamma_0 \right) \tag{3.26}$$

um zwei Randterme zu ergänzen,

$$S_{\rm F} = \int d^4 x \,\overline{\psi}(x) \left[\gamma_{\mu} D_{\mu} + m\right] \psi(x) - \int d^3 \mathbf{x} \left[\overline{\psi}(x) P_{-} \psi(x)\right]_{x_0=0} - \int d^3 \mathbf{x} \left[\overline{\psi}(x) P_{+} \psi(x)\right]_{x_0=L}.$$
 (3.27)

Dabei ist die kovarinate Ableitung

$$D_{\mu}\psi(x) = \partial_{\mu}\psi(x) + A_{\mu}(x)\psi(x). \tag{3.28}$$

Die zugehörigen Randfelder sind

$$P_{+}\psi|_{x_{0}=0} = \rho, \qquad P_{-}\psi|_{x_{0}=L} = \rho',$$
  

$$\overline{\psi}P_{-}|_{x_{0}=0} = \overline{\rho}, \qquad \overline{\psi}P_{+}|_{x_{0}=L} = \overline{\rho}'.$$
(3.29)

Damit ist eine quantenmechanische Interpretation wie in Abschnitt 3.2 möglich. Die Quarkfelder sollen weiterhin modulo einer Phase  $\theta_k$  periodischen Randbedingungen genügen,

$$\psi(x+L\hat{k}) = e^{i\theta_k} \psi(x), \qquad (3.30a)$$

$$\overline{\psi}(x+L\hat{k}) = \overline{\psi}(x) e^{-i\theta_k}.$$
(3.30b)

## 3.6 Korrelationsfunktionen

Korrelationsfunktionen sind über die Erwartungswerte eines Produktes O von Feldern bei verschwindenden Randwerten  $\overline{\rho}' = \rho' = \overline{\rho} = \rho = 0$  definiert,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \left\{ \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathbf{D}[A] \mathbf{D}[\psi] \mathbf{D}[\overline{\psi}] \mathcal{O} \, \mathrm{e}^{-S[U,\psi,\overline{\psi}]} \right\}_{\overline{\rho}' = \rho' = \overline{\rho} = \rho = 0}.$$
(3.31)

 $\mathcal{O}$  kann sich dabei aus den Eich-, Quark- und Antiquarkfeldern  $A, \psi, \overline{\psi}$  zusammensetzen, über die in diesem Ausdruck integriert wird, darüberhinaus aber auch aus den "Randfeldern"

$$\zeta(\mathbf{x}) = \frac{\delta}{\delta \overline{\rho}(\mathbf{x})}, \qquad \overline{\zeta}(\mathbf{x}) = -\frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{x})},$$
  

$$\zeta'(\mathbf{x}) = \frac{\delta}{\delta \overline{\rho}'(\mathbf{x})}, \qquad \overline{\zeta}'(\mathbf{x}) = -\frac{\delta}{\delta \overline{\rho}'(\mathbf{x})}.$$
(3.32)

29

Diese Randfelder treten zum Beispiel in den Definitionen

$$\mathcal{O}^{a} = \int d^{3}\mathbf{u} \int d^{3}\mathbf{v} \,\overline{\zeta}(\mathbf{u}) \gamma_{5} \frac{1}{2} \tau^{a} \zeta(\mathbf{v}), \qquad (3.33a)$$

$$\mathcal{O}^{\prime a} = \int d^3 \mathbf{u} \int d^3 \mathbf{v} \,\overline{\zeta}^{\prime}(\mathbf{u}) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^a \zeta^{\prime}(\mathbf{v}) \tag{3.33b}$$

auf. Hieraus lassen sich die Korrelationsfunktionen

ger-Funktional

$$f_{\rm P}(x_0) = -\frac{1}{3} \left\langle P^a(x) \mathcal{O}^a \right\rangle, \qquad (3.34a)$$

$$f_{\rm A}(x_0) = -\frac{1}{3} \left\langle A_0^a(x) \mathcal{O}^a \right\rangle, \qquad (3.34b)$$

$$f_1 = \left\langle \mathcal{O}'^a \mathcal{O}^a \right\rangle \tag{3.34c}$$

nal

konstruieren, wobei  $f_P$  dem Einfügen der pseudoskalaren Dichte  $P^a$ , Gleichung (2.32b), und  $f_A$  dem des Axialstroms  $A_0^a$ , Gleichung (2.32a), zum Zeitpunkt  $x_0$  im Inneren des Zylinders entspricht.  $f_P$ ,  $f_A$  und  $f_1$  sind in den Abbildungen 3.2 und 3.3 graphisch dargestellt.



## 3.7 Gitterformulierung

Die bisherige Beschreibung des Schrödinger-Funktionals galt für das Kontinuum. Nun soll beschrieben werden, wie das SF auf das Gitter übertragen werden kann. Dazu definiert man ein vierdimensionales hyperkubisches Gitter, wie in Kapitel 2 erwähnt. Es bietet sich an, die Quarkfelder auch außerhalb des SF-Zylinders zu definieren, und zwar, indem man ihnen außen den Wert Null zuweist,

$$\psi(x) = 0$$
, falls  $x_0 < 0$  oder  $x_0 > L$ , (3.35)

und den Projektoren

$$P_{-}\psi(x)|_{x_{0}=0} = P_{+}\psi(x)|_{x_{0}=L} = 0.$$
(3.36)

Verfährt man ebenso auch für die Antiquarkfelder, kann die Fermionwirkung nun wie in Gleichung (2.18) geschrieben werden, wobei die Summe wegen Gleichung (3.35) weiterhin über alle Gitterpunkte *x* laufen kann. Die Eichwirkung

$$S_{\rm G}[U] = \frac{1}{g_0^2} \sum_p w(p) \operatorname{Sp} \{1 - U(p)\}$$
(3.37)

ist analog zu der in Gleichung (2.7) mit Ausnahme des zusätzlichen Gewichtungsfaktors

 $w(p) = \begin{cases} \frac{1}{2}c_s & \text{falls } p \text{ eine räumliche Plakette am Rand } x_0 = 0 \text{ oder } x_0 = L \text{ ist,} \\ c_t & \text{falls } p \text{ eine zeitliche Plakette verbunden mit einer Grenzfläche ist,} \\ 1 & \text{falls } p \text{ im Innern liegt.} \end{cases}$ 

Für normale Wilson-Fermionen wird

$$c_{\rm s} = c_{\rm t} = 1 \tag{3.39}$$

gewählt. Zur Spezifizierung der Randbedingungen müssen dann bei  $x_0 = 0$  und  $x_0 = L$  Paralleltransporter von  $x + a\hat{k}$  nach x gefunden werden. Diese sind durch

$$U(x,k)|_{x_0=0} = e^{aC_k}, (3.40a)$$

$$U(x,k)|_{x_0=L} = e^{aC'_k}, \quad k = 1, 2, 3$$
(3.40b)

gegeben. Für die in Gleichungen (3.22) und (3.23) verwendeten Randfelder ergibt sich durch diese Randbedingungen gerade eine eindeutige Konfiguration *V*, welche die Wirkung minimiert: das Gitter-Hintergrundfeld. *V* kann daher durch das Hinter-grundfeld *B*, Gleichung (3.24), ausgedrückt werden,

$$V(x,\mu) = e^{aB_{\mu}(x)}.$$
 (3.41)

Für die in Gleichungen (3.34) definierten Korrelationsfunktionen gilt nun in der Gitterformulierung

$$f_{\rm P}(x_0) = -a^6 \sum_{\mathbf{y}, \mathbf{z}} \frac{1}{3} \left\langle P^a(x) \overline{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^a \zeta(\mathbf{z}) \right\rangle, \qquad (3.42a)$$

$$f_{\rm A}(x_0) = -a^6 \sum_{\mathbf{y}, \mathbf{z}} \frac{1}{3} \left\langle A^a_0(x) \overline{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^a \zeta(\mathbf{z}) \right\rangle, \qquad (3.42b)$$

$$f_{1} = -\frac{a^{12}}{L^{6}} \sum_{\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, \mathbf{z}} \frac{1}{3} \left\langle \overline{\zeta}'(\mathbf{u}) \gamma_{5} \frac{1}{2} \tau^{a} \zeta'(\mathbf{v}) \overline{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_{5} \frac{1}{2} \tau^{a} \zeta(\mathbf{z}) \right\rangle.$$
(3.42c)

Damit lassen sich Renormierungsfaktoren

$$Z_{\rm P} = c \cdot \frac{\sqrt{f_1}}{f_{\rm P}(x_0 = L/2)} \bigg|_{m_0 = m_{\rm c}},$$
(3.43a)

$$Z_{\rm A} = \tilde{c} \cdot \left. \frac{\sqrt{f_1}}{f_{\rm A}(x_0 = L/2)} \right|_{m_0 = m_{\rm c}}$$
 (3.43b)

definieren, wobei *c* und  $\tilde{c}$  so gewählt werden, dass auf Baumgraphenniveau  $Z_{P,A} = 1$  ist. Werte für *c* und  $\tilde{c}$  für einige Gitterauflösungen sind in Tabelle B.3 gezeigt. Konventionell werden dabei die Werte von  $f_{P,A}$  bei  $x_0 = L/2$  verwendet. Die Definitionen (3.43) sind in ihrer Form dadurch motiviert, dass sich die Renormierungsterme der Randfelder (3.32),  $Z_{\zeta}$ , welche in den Definitionen der Korrelationsfunktionen (3.34) über (3.33) auftreten, gerade herauskürzen.

In der Ebene der nackten Parameter erwartet man eine kritische Linie, auf der die physikalische Quarkmasse verschwindet, und definiert demgemäß eine kritische Quarkmasse [9],

$$m_0 = m_{\rm c}(g_0). \tag{3.44}$$

Weiterhin definiert man die subtrahierte Quarkmasse dann als

$$m_{\rm q} = m_0 - m_{\rm c}.\tag{3.45}$$

Die Bezeichnung  $m_0 = m_c$  in Gleichungen (3.43) bedeutet also, dass die Größen bei der kritischen, also bei verschwindender subtrahierter Quarkmasse, bestimmt werden.

Nun kann aus den Gleichungen (3.43)

$$Z_{\rm AP} = \frac{Z_{\rm A}}{Z_{\rm P}} \tag{3.46a}$$

$$= \frac{\tilde{c}}{c} \cdot \left. \frac{f_{\rm P}(x_0 = L/2)}{f_{\rm A}(x_0 = L/2)} \right|_{m_0 = m_{\rm c}}$$
(3.46b)

konstruiert werden, vergleiche Gleichung (1.10). Eine zusätzliche additive Renormierung wie in Gleichung (1.8) ist bei Rechnungen in einem masselosen Renormierungsschema, vergleiche Gleichung (3.45), nicht vonnöten, da dann der Term  $b_{A,P}am_q$  verschwindet.

Die in Gleichung (2.35) motivierte PCAC-Masse kann nun ebenfalls durch die Gitter-Korrelationsfunktionen ausgedrückt werden,

$$m = \frac{\tilde{\partial} f_{\rm A}^{\rm I}(x_0)}{2f_{\rm P}(x_0)} \bigg|_{x_0 = L/2},$$
(3.47)

wobei hier  $\tilde{\partial}$  wie in Gleichung (2.36) und die verbesserte Korrelationsfunktion

$$f_{\rm A}^{\rm I} = f_{\rm A} + ac_{\rm A} \frac{1}{2} \tilde{\partial} f_{\rm P} \tag{3.48}$$

verwendet wurden.  $c_A$  ist in Abhängigkeit von  $g_0^2$  sowohl perturbativ [26] als auch nichtperturbativ bekannt, für  $N_f = 0$  [20], und für den hier verwendeten Fall  $N_f = 2$  [27],

$$c_{\rm A}(g_0^2) = -0.00756g_0^2 \times \frac{1 - 0.4485g_0^2}{1 - 0.8098g_0^2}.$$
(3.49)

## **3.8** O(a)-Verbesserung im Schrödinger-Funktional

Bei der Übertragung des SFs auf das Gitter muss die O(a)-Verbesserung der Gitter-QCD, wie in Abschnitt 2.4 eingeführt, erweitert werden. Dadurch, dass das SF ein endliches Volumen einnimmt, werden an den Rändern ebenfalls O(a)-Effekte induziert, die gesondert eliminiert werden müssen. Die Effekte auf das reine Eichfeld sind mit der Wahl (3.38) des Gewichtungsfaktors und geigneten  $c_s$  und  $c_t$  in der Eichwirkung (3.37) bereits kompensiert. Für das Quarkfeld allerdings bedarf es aufgrund dieser Randeffekte eines weiteren Verbesserungsterms  $\delta S_{F,b}$  (englisch *b*oundary). Ein solcher
kann in der Form [9]

$$\delta S_{\text{F,b}}[U,\overline{\psi},\psi] = a^4 \sum_{\mathbf{x}} \left\{ (\tilde{c}_{\text{s}}-1) \left[ \hat{\mathcal{O}}_{\text{s}}(\mathbf{x}) + \hat{\mathcal{O}}_{\text{s}}'(\mathbf{x}) \right] + (\tilde{c}_{\text{t}}-1) \left[ \hat{\mathcal{O}}_{\text{t}}(\mathbf{x}) - \hat{\mathcal{O}}_{\text{t}}'(\mathbf{x}) \right] \right\}$$
(3.50)

geschrieben werden, wobei die hier auftretenden Felder

$$\hat{\mathcal{O}}_{s}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\overline{\rho}(\mathbf{x})\gamma_{k}(\nabla_{k}^{*} + \nabla_{k})\rho(\mathbf{x}), \qquad (3.51a)$$

$$\hat{\mathcal{O}}'_{\rm s}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\overline{\rho}'(\mathbf{x})\gamma_k(\nabla_k^* + \nabla_k)\rho'(\mathbf{x}), \qquad (3.51b)$$

$$\hat{\mathcal{O}}_{\mathsf{t}}(\mathbf{x}) = \left\{ \overline{\psi}(y) P_{+} \nabla_{0}^{*} \psi(y) + \overline{\psi}(y) \overleftarrow{\nabla}_{0}^{*} P_{-} \psi(y) \right\}_{y=(a,\mathbf{x})},$$
(3.51c)

$$\hat{\mathcal{O}}_{\mathsf{t}}'(\mathbf{x}) = \left\{ \overline{\psi}(y) P_{-} \nabla_{0} \psi(y) + \overline{\psi}(y) \overleftarrow{\nabla}_{0}^{*} P_{+} \psi(y) \right\}_{y = (T-a, \mathbf{x})}$$
(3.51d)

aus den Randfeldern gebildet werden.

# 4 Die laufende Quarkmasse und ihre Zwei-Schleifen anomale Dimension

### 4.1 Die Callan-Symanzik-Gleichung und die RGI-Parameter

Eine physikalische Observable *P* bezeichnet man als Renormierungsgruppeninvariante, wenn sie die Callan-Symanzik-Gleichung erfüllt [28, 29],

$$\left\{\mu\frac{\partial}{\partial\mu} + \beta(g_{\rm R})\frac{\partial}{\partial g_{\rm R}} + \tau(g_{\rm R})\sum_{i=1}^{N_{\rm f}} m_{{\rm R},i}\frac{\partial}{\partial m_{{\rm R},i}}\right\}P = 0.$$
(4.1)

Die laufende Kopplung und die laufenden Quarkmassen können über Integration der Renormierungsgruppengleichungen

$$\mu \frac{\partial \overline{g}}{\partial \mu} = \beta(\overline{g}), \tag{4.2a}$$

$$\mu \frac{\partial \overline{m}_i}{\partial \mu} = \tau(\overline{g}) \overline{m}_i \tag{4.2b}$$

mit den Randbedingungen

$$\overline{g}(\mu) = g_{\mathrm{R}},\tag{4.3a}$$

$$\overline{m}_i(\mu) = m_{\mathrm{R},i}, \quad i = 1, \dots, N_\mathrm{f} \tag{4.3b}$$

bestimmt werden. Hier treten die  $\beta$ - und  $\tau$ -Funktionen auf. Diese sind im Allgemeinen nichtperturbativ definiert, für kleine Kopplungen,  $g \rightarrow 0$ , können sie jedoch perturbativ entwickelt werden,

$$\beta(g) \stackrel{g \to 0}{\sim} -g^3 \sum_{k=0}^{\infty} b_k g^{2k},$$
(4.4a)

$$\tau(g) \stackrel{g \to 0}{\sim} -g^2 \sum_{k=0}^{\infty} d_k g^{2k}.$$
 (4.4b)

Von den dabei auftretenden Koeffizienten  $b_k$ ,  $d_k$  sind die folgenden universell bekannt, das heißt, sie sind unhabhängig vom gewählten Renormierungsschema:

$$b_0 = \frac{1}{(4\pi)^2} \left( \frac{11}{3} N - \frac{2}{3} N_{\rm f} \right), \tag{4.5a}$$

$$d_0 = \frac{1}{(4\pi)^2} 6C_{\rm F},\tag{4.5b}$$

$$b_1 = \frac{1}{(4\pi)^4} \left( \frac{34}{3} N^2 - \left( \frac{13}{3} N - N^{-1} \right) N_{\rm f} \right), \tag{4.5c}$$

mit

$$C_{\rm F} = \left(N^2 - 1\right) / (2N) \tag{4.6}$$

für die Eichgruppe SU(N).

Zugehörige Beispiele für Renormierungsgruppeninvariante sind der  $\Lambda$ -Parameter der QCD und die RGI-Masse, die bereits in Gleichungen (1.4) definiert wurden.

Wie bereits in Abbildung 1.1 angedeutet, liegen die Renormierungsgruppeninvarianten bei "unendlicher" Energie: Sie sind unabhängig von der Energieskala. Aus technischer Sicht sind sie die Integrationskonstanten der Integration der Differentialgleichungen (4.2) [7]. Die renormierungsgruppeninvarianten Quarkmassen  $M_i$  sind zudem unabhängig vom verwendeten Renormierungsschema, während  $\Lambda$  vom verwendeten Renormierungsschema abhängt. So gilt zwischen  $\Lambda$  in einem und  $\Lambda'$  in einem anderen Renormierungsschema folgende Relation,

$$\Lambda' = \Lambda \exp\left\{\mathcal{X}_{g}^{(1)}/2b_{0}\right\},\tag{4.7}$$

 $\mathcal{X}_{g}$  wird im nächsten Abschnitt definiert. Jede physikalische Observable kann als Funktion der RGI-Parameter geschrieben werden [30],

$$P(\mu, g_{\mathbf{R}}, \{m_{\mathbf{R},i}\}) = \hat{P}(\Lambda, \{M_i\}).$$
(4.8)

Daher werden diese auch als fundamentale Parameter der QCD bezeichnet.

## **4.2 Berechnung von** $d_1^{\text{SF}}$

Um die Berechnung der RGI-Masse  $M_i$  aus Gleichung (1.4b) im Schrödinger-Funktional-Schema, Kapitel 3, im Hochenergiebereich störungstheoretisch fortsetzen zu können, dabei aber den Fehler in der Störungsrechnung gering zu halten, sollten die Expansionskoeffizienten der Entwicklungen der  $\beta$ - und  $\tau$ -Funktionen, Gleichungen (4.4), in gewünschter Ordnung bekannt sein. Beide sollten jedoch bis zur zweiten Ordnung bekannt sein. Da die Koeffizienten bis zur Ein-Schleifen-Ordnung ebenso wie der Zwei-Schleifen-Koeffizient der  $\beta$ -Funktion universell sind, Gleichungen (4.5), ist also der Zwei-Schleifen-Koeffizient  $d_1$  der  $\tau$ -Funktion im verwendeten Schema gesucht, hier dem SF. Ferner ist auch der Drei-Schleifen-Koeffizient  $b_2$  aus der Literatur bekannt [31], daher soll nun die Zwei-Schleifen anomale Quarkmassendimension,  $d_1$ , im SF berechnet werden.

Zwei massenunabhängige Renormierungsschemata mit diagonalen Quarkmassenmatrizen hängen über folgende Parameterrenormierungen zusammen [30],

$$\mu' = c\mu, \quad c > 0, \tag{4.9a}$$

$$g'_{\rm R} = g_{\rm R} \sqrt{\mathcal{X}_{\rm g}(g_{\rm R})},\tag{4.9b}$$

$$m'_{\mathrm{R},i} = m_{\mathrm{R},i} \mathcal{X}_{\mathrm{m}}(g_{\mathrm{R}}), \quad i = 1, \dots, N_{\mathrm{f}}.$$
 (4.9c)

Wenn eine physikalische Observable unter diesen Transformationen invariant ist, so gibt es eine Funktion P', die folgender Relation genügt,

$$P'\left(\mu'(\mu), g'_{\mathsf{R}}(g_{\mathsf{R}}), \left\{m'_{\mathsf{R},i}(g_{\mathsf{R}}, m_{\mathsf{R},i})\right\}\right) = P\left(\mu, g_{\mathsf{R}}, \{m_{\mathsf{R},i}\}\right),\tag{4.10}$$

und die die Callan-Symanzik-Gleichung im gestrichenen System erfüllt, wobei die  $\beta$ und  $\tau$ -Funktionen im gestrichenen System durch

$$\beta'(g'_{\rm R}) = \left\{\beta(g_{\rm R})\frac{\partial g'_{\rm R}}{\partial g_{\rm R}}\right\}_{g_{\rm R}=g_{\rm R}(g'_{\rm R})},\tag{4.11a}$$

$$\tau'(g'_{R}) = \left\{\tau(g_{R}) + \beta(g_{R})\frac{\partial}{\partial g_{R}}\ln\mathcal{X}_{m}(g_{R})\right\}_{g_{R}=g_{R}(g'_{R})}$$
(4.11b)

gegeben sind.

Weiterhin gilt folgende Relation für den Zusammenhang von  $d_1$  in zwei Renormierungsschemata [30]:

$$d_1' = d_1 + 2b_0 \mathcal{X}_{\rm m}^{(1)} - d_0 \mathcal{X}_{\rm g}^{(1)}. \tag{4.12}$$

Mit Gleichung (4.12) kann nun also unter Kenntnis von [30]

$$d_1^{\overline{\text{MS}}} = \frac{1}{(4\pi)^4} C_F\left(\frac{203}{6}N - \frac{3}{2}N^{-1} - \frac{10}{3}N_f\right)$$
(4.13)

 $d_1$  in einem beliebigen anderen Renormierungsschema, also z.B. dem SF, bestimmt

werden. Der Vorteil an dieser Relation ist, dass  $d_1$ , eine Zwei-Schleifen-Größe, nun aus Ein-Schleifen-Größen bestimmt werden kann. Dadurch wird eine erheblich aufwändigere direkte Zwei-Schleifen-Rechnung vermieden.

In Gleichung (4.12) sind  $\mathcal{X}_{m,g}^{(1)}$  die Ein-Schleifen-Terme der störungstheoretischen Entwicklung der  $\mathcal{X}_{m,g}$  aus den Gleichungen (4.9) für  $g_R \to 0$ ,

$$\mathcal{X}_{m,g}(g_R) \stackrel{g_R \to 0}{\sim} 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \mathcal{X}_{m,g}^{(k)} g_R^{2k}.$$
 (4.14)

Es ist im SF mit  $\theta = \pi/5$  [30]

$$\mathcal{X}_{g}^{(1)} = 2b_0 \ln(qL) - \frac{1}{4\pi} \left( c_{1,0} + c_{1,1} N_{f} \right),$$
 (4.15)

wobei

$$c_{1,0} = 1.25563(4), \quad c_{1,1} = 0.039863(2)$$
 (4.16)

numerisch bekannt sind [30, 32].

 $\mathcal{X}_{m}$  ist bestimmt durch

$$\mathcal{X}_{\rm m} = \frac{\overline{m}_{\rm SF}}{\overline{m}_{\rm MS}},\tag{4.17}$$

wobei  $\mathcal{X}_{m}^{(1)}$  in Gleichung (4.12) als der Term erster Ordnung der störungstheoretischen Entwicklung von Gleichung (4.17) in  $g_0^2$  zu verstehen ist, vergleiche Gleichung (4.14), und dabei für  $\overline{m}_{SF,\overline{MS}}$  ebenfalls eine störungstheoretische Reihenentwicklung der laufenden Quarkmassen im SF- bzw.  $\overline{MS}$ -Schema einzusetzen ist. Aus [30, 33, 34] sind

$$\overline{m}_{\overline{\text{MS}}} = m_{q} \left\{ 1 + g_{0}^{2} \left[ -d_{0} \ln(a\mu) + 0.122282(1) \cdot C_{\text{F}} \right] + O(g_{0}^{4}) \right\}$$
(4.18)

und

$$\overline{m}_{\rm SF} = m_q \left\{ 1 + g_0^2 \left[ Z_{\rm A}^{(1)} - Z_{\rm P}^{(1)} + Z_{\rm m}^{(1)} \right] + O(g_0^4) \right\}.$$
(4.19)

 $Z_{\rm m}^{(1)}$  ist bekannt [10]. Es soll nun also weiterhin

$$Z_{\rm AP}^{(1)} = \left( Z_{\rm A}^{(1)} - Z_{\rm P}^{(1)} \right) \tag{4.20}$$

bestimmt werden. Dabei ist  $Z_{AP}^{(1)}$  der Ein-Schleifen-Koeffizient der störungstheoretischen Reihenentwicklung in  $g_0^2$ ,

$$Z_{\rm AP} = 1 + g_0^2 Z_{\rm AP}^{(1)} + O(g_0^4). \tag{4.21}$$

38

Diese Berechnung wird im nächsten Abschnitt ausgeführt.

## 4.3 Bestimmung von $Z_{AP}^{(1)}$

Nach Gleichung (3.43b) ist

$$Z_{\rm A} = \tilde{c} \frac{\sqrt{f_1}}{f_{\rm A}}.\tag{4.22}$$

Dabei ist

$$\tilde{c} = \frac{f_{\rm A}^{(0)}}{\sqrt{f_1^{(0)}}} \tag{4.23}$$

eine Normierungskonstante, die gerade so definiert ist, dass auf Baumgraphenniveau  $Z_A = 1$  ist. Einige Werte für  $\tilde{c}$  sind in Tabelle B.3 für verschiedene Gittergrößen L gezeigt.

Die Berechnung von  $Z_A$  folgt [35]. Demgemäß können nun perturbative Reihenentwicklungen für  $f_{A,1}$  in  $g_0^2$ ,

$$f_{\rm A,1} = f_{\rm A,1}^{(0)} + g_0^2 f_{\rm A,1}^{(1)} + O(g_0^4), \tag{4.24}$$

angesetzt werden. Das Einsetzen der Entwicklungen (4.24) liefert, bis zur 1. Ordnung in  $g_0^2$ ,

$$\frac{\sqrt{f_1}}{f_A} = \frac{\sqrt{f_1^{(0)} + g_0^2 f_1^{(1)} + O(g_0^4)}}{f_A^{(0)} + g_0^2 f_A^{(1)} + O(g_0^4)}.$$
(4.25)

Dieser Bruch (4.25) kann nun mit den Taylor-Entwicklungen

$$\sqrt{a+x} = \sqrt{a} + \frac{1}{2\sqrt{a}}x + O(x^2),$$
 (4.26a)

$$\frac{1}{a+x} = \frac{1}{a} - \frac{1}{a^2}x + O(x^2)$$
(4.26b)

umgeschrieben werden. Dann ist, bis zur ersten Ordnung in  $g_0^2$ ,

$$\frac{\sqrt{f_1}}{f_A} = \left(\sqrt{f_1^{(0)}} + g_0^2 \frac{1}{2\sqrt{f_1^{(0)}}} f_1^{(1)} + O(g_0^4)\right) \left(\frac{1}{f_A^{(0)}} - g_0^2 \frac{1}{\left(f_A^{(0)}\right)^2} f_A^{(1)} + O(g_0^4)\right) \\
= \frac{\sqrt{f_1^{(0)}}}{f_A^{(0)}} + g_0^2 \left[\frac{f_1^{(1)}}{2\sqrt{f_1^{(0)}} f_A^{(0)}} - \frac{\sqrt{f_1^{(0)}} f_A^{(1)}}{\left(f_A^{(0)}\right)^2}\right] + O(g_0^4) \\
= \frac{\sqrt{f_1^{(0)}}}{f_A^{(0)}} \left\{1 + g_0^2 \left[\frac{f_1^{(1)}}{2f_1^{(0)}} - \frac{f_A^{(1)}}{f_A^{(0)}}\right] + O(g_0^4)\right\}.$$
(4.27)

Es ist also

$$Z_{\rm A}^{(1)} = \frac{f_1^{(1)}}{2f_1^{(0)}} - \frac{f_{\rm A}^{(1)}}{f_{\rm A}^{(0)}}$$
(4.28a)

$$= z_{\rm A}(\theta) \cdot C_{\rm F} + O(a^2). \tag{4.28b}$$

Dieser Ausdruck ist mit einem dafür modifizierten Satz vorhandener FORTRAN-Programme berechnet werden.

Z<sub>A</sub> hat dabei die folgende Gestalt [36]

$$Z_{\rm A}^{(1)}(L/a) \overset{L/a \to \infty}{\sim} z_{\rm A} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{A_n + B_n \ln(L/a)}{(L/a)^n}.$$
 (4.29)

Daraus kann  $z_A$  mittels der erstmals in [36] vorgestellten Blocking-Methode extrahiert werden, indem die  $(L/a)^n$ -Beiträge Ordnung für Ordnung in einzelnen Blocking-Schritten entfernt werden. Werden die  $(L/a)^n$ -Kontaminationen auf diese Art eliminiert, kann der Kontinuumswert von  $z_A$  abgeschätzt werden [34]. Für  $\theta = 0.5$  ergibt sich damit <sup>†</sup>

$$z_{\rm A} = -0.054606(49). \tag{4.30}$$

Da ferner  $Z_{\rm P}^{(1)}$  bekannt ist [30], können jetzt  $\overline{m}_{\rm SF}^{(1)}$ , Gleichung (4.18), und  $\overline{m}_{\overline{\rm MS}}^{(1)}$ , Gleichung (4.19), zur Bestimmung von  $\mathcal{X}_{\rm m}^{(1)}$  in Gleichung (4.17) eingesetzt werden. Da  $\mathcal{X}_{\rm g}^{(1)}$ , Gleichung (4.15), und  $\overline{d}_{1}^{\overline{\rm MS}}$ , Gleichung (4.13), bekannt sind, kann nun über die Identität (4.12)  $d_{1}^{\rm SF}$  bestimmt werden.

<sup>&</sup>lt;sup>+</sup>Besonderer Dank geht an Dirk Hesse für die Zurverfügungstellung seines Blocking-Programms, mit dem die Berechnung dieses Wertes durchgeführt worden ist.

Es ergibt sich

$$d_1^{\rm SF} = 0.0077841(54). \tag{4.31}$$

Der Fehler von  $d_1^{SF}$  ergibt sich aus der Fehlerfortpflanzung der Größen in Gleichung (4.12).

Damit ist nun die Zwei-Schleifen anomale Quarkmassendimension, also der zweite Koeffizient der störungstheoertischen Reihenentwicklung der  $\tau$ -Funktion, Gleichung (4.4b), im Schrödinger-Funktional-Schema bekannt. Dies ist nun hinreichend genau, um damit, in Gleichung (1.4b) für  $\tau(x)$  eingesetzt, in diesem Renormierungsschema den perturbativen Teil der Berechnung der RGI-Masse durchzuführen. Diese Rechnung wird im nächsten Kapitel besprochen.

## **5** Bestimmung von Z<sub>M</sub>

Wie bereits in Kapitel 1, Gleichung (1.7), gezeigt, ist

$$Z_{\mathbf{M}}(g_0) = \frac{M}{\overline{m}(\mu)} \times \frac{Z_{\mathbf{A}}(g_0)}{Z_{\mathbf{P}}(g_0,\mu)}$$
$$= \frac{M}{\overline{m}(\mu)} \times Z_{\mathbf{A}\mathbf{P}}(g_0,\mu).$$
(5.1)

In diesem Kapitel soll nun zunächst der erste, universelle Faktor,  $M/\overline{m}(\mu)$ , bestimmt werden, dann in Abschnitt 5.4 der zweite, nicht universelle Faktor  $Z_{AP}(g_0, \mu)$ . Aus dem Produkt der beiden kann dann  $Z_M(g_0)$  berechnet werden. Die Vorgehensweise dazu folgt dabei strukturell der in der Literatur [6, 7] dargestellten.

Zur Bestimmung des ersten Faktors kann Gleichung (1.12) verwendet werden,

$$\frac{M}{\overline{m}(\mu_{\text{low}})} = \frac{M}{\overline{m}(\mu_{\text{high}})} \times \frac{\overline{m}(\mu_{\text{high}})}{\overline{m}(\mu_{\text{low}})}.$$
(5.2)

Der erste Term der Gleichung (5.2),  $M/\overline{m}(\mu_{high})$ , kann perturbativ berechnet werden. Für die nichtperturbative Berechnung des zweiten Teils,  $\overline{m}(\mu_{high})/\overline{m}(\mu_{low})$ , kann dann die in Abschnitt 1.5 eingeführte Step-Scaling-Funktion verwendet werden. Der vollständige Ausdruck kann damit nach Gleichungen (1.15b) und (1.17b) geschrieben werden als

$$\frac{M}{\overline{m}(1/L_{\max})} = w_k^{-1} \times \frac{M}{\overline{m}(1/L_k)},$$
(5.3)

mit

$$w_0 = 1, \tag{5.4a}$$

$$w_k = \prod_{i=1}^k \sigma_{\rm AP}(u_k). \tag{5.4b}$$

Der Index k in den Gleichungen (5.3) und (5.4) ist dabei über die rekursive Gleichung für die Kopplungen  $u_k$ ,

$$\sigma(u_{k+1}) = u_k,\tag{5.5}$$

42

gegeben. Die Skalenevolution beginne dabei im Niederenergiebereich bei einer Energieskala  $1/L_{max}$ ,

$$u_0 = \overline{g}^2(L_{\max}) = 4.61^{\dagger}, \tag{5.6}$$

und reiche zu höheren Energieskalen  $1/L_k$ , k = 1, ..., 8. Die Vorgehensweise zur Lösung dieser rekursiven Gleichung wird im nächsten Abschnitt ausgeführt.

### **5.1 Rekursion für** *u*<sub>k</sub>

Als Eingangsdaten zur Lösung der rekursiven Gleichung (5.5) werden die Werte von *u* aus [8], Tabelle 5.1, verwendet.

		ı.	I.			
	и	$\sigma(u)$	$\Delta\sigma(u)$	k		$u_k$
	0.9793	1.0778	0.0036	0	)	4.61
	1.1814	1.3285	0.0050	1		3.038(16)
	1.5031	1.741	0.012	2	•	2.346(21)
	1.7319	2.049	0.020	3	;	1.921(20)
	1.5031	1.738	0.010	4	:	1.628(17)
	2.0142	2.516	0.022	5	;	1.413(14)
	2.4792	3.281	0.039	6	)	1.250(12)
	3.3340	5.670	0.080	7	,	1.121(10)
Ta	Taballa 5.1. Worto yon 11 and [9]			81	;	1.018(10)
111	<i>Iuvelle 5.1:</i> werte von $u$ aus $[\delta]$			0]		

Tabelle 5.2: Lösungen von (5.5):  $u_k$  für<br/>verschiedene k aus Abbil-<br/>dung 5.1. Die Berechnung des<br/>Fehlers der Werte ist in Ab-<br/>schnitt C.1 beschrieben.

Die Werte von *u* aus Tabelle 5.1 können dazu durch ein Polynom interpoliert werden [4],

$$\sigma(u) = u + s_0 u^2 + s_1 u^3 + s_2 u^4 + s_3 u^5 + s_4 u^6, \tag{5.7}$$

<sup>&</sup>lt;sup>+</sup>Der Wert von  $\overline{g}^2 = 4.61$  entspricht gerade  $\beta \sim 5$ , einem Bereich der Kopplung, in dem konventionell viele weiterführende Rechnungen durchgeführt werden. Vergleiche auch Abschnitt 5.4 und Tabelle 5.8.

Parameter	$s_0$	<i>s</i> <sub>1</sub>	<i>s</i> <sub>2</sub>	s <sub>3</sub>	$s_4$
Wert	0.0790093	0.010449	0.0244084	-0.0181697	0.00403666

*Tabelle 5.3:* Ergebnisse des Fits für  $\sigma(u)$ , Gleichung (5.7)

mit [8]

$$s_0 = 2b_0 \ln 2,$$
 (5.8a)

$$s_1 = (2b_0 \ln 2)^2 + 2b_1 \ln 2;$$
 (5.8b)

dies entspricht einer Fixierung der führenden Asymptotik für kleine u.

Der Fit ist mit dem Gauß-Jordan-Algorithmus [37] durchgeführt worden. Die resultierenden Fitparameter sind in Tabelle 5.3 eingetragen. Der Fit ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Das Lösen von Gleichung (5.5) entspricht nun einer rekursiven Nullstellensuche mit dem Anfang (5.6), also

$$0 = u_1 + s_0 u_1^2 + s_1 u_1^3 + s_2 u_1^4 + s_3 u_1^5 + s_4 u_1^6 - 4.61.$$
(5.9)

Gleichung (5.9) kann numerisch gelöst werden; das Ergebnis für  $u_1$  wird dann gemäß (5.5) und (5.7) zur Berechnung von  $u_2$  verwendet und so fort. Es ergeben sich Werte für  $u_k, k = 0, ..., 8$  wie in Tabelle 5.2 gezeigt. Das Verfahren zur Bestimmung der Unsicherheiten der einzelnen  $u_k$  ist in Abschnitt C.1 beschrieben.

#### 5.2 Der Integralteil

Zur Bestimmung des Integralteils muss Gleichung (1.4b) für verschiedene k gelöst werden. Für die  $\beta$ - und  $\tau$ -Funktionen können nun ihre störungstheoretischen Reihenexpansionen (4.4) eingesetzt werden. Mit Gleichung (1.24a),

$$u_k = \overline{g}^2(L_k), \tag{5.10}$$



*Abbildung 5.1:* Polynomialer Fit für  $\sigma(u)$  gemäß (5.7). Die Koeffizienten des Polynoms sind in Tabelle 5.3 eingetragen.

k	$u_k$	$M/\overline{m}(1/L_k)$	$\sigma_{\rm AP}(u_k)$
0	4.61	1.0637022	0.74951075
1	3.038(16)	1.3355924	0.83663257
2	2.346(21)	1.5247536	0.87806019
3	1.921(20)	1.6834873	0.90350926
4	1.628(17)	1.8235819	0.92068838
5	1.413(14)	1.9497476	0.9329334
6	1.250(12)	2.0648077	0.94202389
7	1.121(10)	2.1707743	0.94899884
8	1.018(10)	2.2691713	0.95449911

*Tabelle 5.4:* Ergebnisse für  $M/\overline{m}(1/L_k)$  aus Gleichung (5.11) und für  $\sigma_{AP}(u_k)$ , vergleiche Gleichung (5.4), für verschiedene  $u_k$ 

ergibt sich also, auf Zwei-Schleifen-Niveau,

$$\frac{M}{\overline{m}(1/L_k)} = (2b_0u_k)^{-d_0/2b_0} \exp\left\{-\int_0^{\sqrt{u_k}} dx \left[\frac{-x^2 \left(d_0 + d_1x^2\right)}{-x^3 \left(b_0 + b_1x^2 + b_2x^4\right)} - \frac{d_0}{b_0x}\right]\right\}.$$
 (5.11)

Mit den Gleichungen (4.5), (4.31) und [31]

$$b_2^{\rm SF}\Big|_{N_{\rm f}=2} = \frac{1}{(4\pi)^3} 0.064(10)$$
 (5.12)

kann (5.11) nun numerisch für verschiedene  $u_k$ , Tabelle 5.2, gelöst werden. Die Ergebnisse dieses Integralteils sind in Tabelle 5.4 gezeigt.

### 5.3 Der Step-Scaling-Teil

Wie bereits in Abschnitt 1.5 angedeutet, kann  $\Sigma_{AP}(u, a/L)$  aus

$$\Sigma_{\rm AP}(u, a/L) = \frac{Z_{\rm AP}(g_0, a/2L)}{Z_{\rm AP}(g_0, a/L)}$$
(5.13)

mit  $Z_{AP}(g_0, L/a)$  aus Gleichung (1.10) berechnet werden, vergleiche Gleichung (1.22). Die Struktur des zu dieser Berechnung verwendeten Datensatzes ist in Tabelle B.1 gezeigt. Die Berechnung der relevanten Größen aus dem Datensatz ist unter Verwen-

и	$\sigma_{ m AP}$	$\Delta \sigma_{ m AP}$
0.9793	1.03778	0.00643862
1.1814	1.05792	0.00296498
1.5031	1.07891	0.00391041
2.0142	1.11194	0.0128098
2.4792	1.14673	0.0201829
3.334	1.22057	0.0224176

*Tabelle 5.5:* Kontinuumswerte  $\sigma_{AP}$  der Step-Scaling-Funktion, Tabelle B.2, Abbildung 5.2. Bei der Kontinuumsextrapolation ist der L = 6-Wert nicht berücksichtigt worden. Der Fehler  $\Delta \sigma_{AP}$  setzt sich zusammen aus dem statistischen Fehler des Fits und der Abweichung des Fits vom L = 8-Wert.

dung des Jackknife-Verfahrens, Abschnitt B.3, durchgeführt worden. Der Fehler der so berechneten Größen ergibt sich aus der Jackknife-Fehlerformel, Gleichung (B.1). Die Ergebnisse der  $Z_{AP}(u, a/L)$ ,  $Z_{AP}(u, a/2L)$  sowie deren Verhältnis  $\Sigma_{AP}(u, a/L)$  für verschiedene Kopplungen  $u_k$  sind in Tabelle B.2 gezeigt. Diese  $\Sigma_{AP}(u, a/L)$  können nun in  $(a/L)^2$  zum Kontinuum extrapoliert werden, vergleiche Gleichung (1.23),

$$\tau_{\rm AP} = \lim_{a \to 0} \Sigma_{\rm AP}(u, a/L). \tag{5.14}$$

Wie in den früheren Arbeiten aus der Literatur erwiesen sich aber die Cutoff-Effekte als klein; daher ist der Wert bei  $\Sigma_{AP}(u, L = 6)$  jeweils bei der Extrapolation nicht berücksichtigt worden. Die Werte für  $\sigma_{AP}(u, a/L)$  sind in Tabelle 5.5 gezeigt. Der Fehler  $\Delta \sigma_{AP}$  ist dabei die Summe des statistischen Fehlers des Fits und der Abweichung des Fits vom Wert bei L = 8. Die Kontinuumsextrapolationen sind in Abbildung 5.2 gezeigt.

Die so erhaltenen  $\sigma_{AP}(u, a/L)$  können durch einen polynomialen Fit interpoliert werden,

$$\sigma_{\rm AP}(u) = 1 + p_0 u + p_1 u^2 + p_2 u^3 + p_3 u^4, \tag{5.15}$$

mit dem führenden, universellen Term

$$p_0 = -d_0 \ln 2. \tag{5.16}$$



Abbildung 5.2: Kontinuumsextrapolation der  $\Sigma_{AP}$  aus Tabelle B.2 für verschiedene Kopplungen *u*. Die L = 6-Werte sind bei der Extrapolation nicht berücksichtigt worden; der Kontinuumswert ist also der gewichtete Mittelwert aus dem L = 8- und dem L = 12-Wert. Die Fehler der Kontinuumswerte sind die Summe aus dem statistischen Fehler der Extrapolation und der Abweichung des Kontinuumswerts vom jeweiligen L = 8-Wert. Die Kontinuumswerte sind in Tabelle 5.5 gezeigt.



*Abbildung 5.3:* Verschiedene Möglichkeiten f(u), g(u), h(u), i(u) des Fits (5.15) durch die Datenpunkte aus Tabelle 5.5. Die Fitparameter sind in Tabelle 5.6 gezeigt. f(u) entspricht den Datenpunkten am besten.

Aufgabe des Fits ist es, die Werte aus Tabelle 5.5 möglichst genau zu beschreiben. Dazu sind drei verschiedene Möglichkeiten f(u), g(u), h(u) des Fits (5.15) betrachtet worden, bei f(u) wurde  $p_3 = 0$  gesetzt, bei g(u)  $p_2 = p_3 = 0$  und bei h(u) wurden  $p_2$  und  $p_3$  als Fitparameter belassen. Zusätzlich ist ein Fit i(u) durchgeführt worden, bei dem neben  $p_1$  und  $p_2$  auch  $p_0$  als Fitparameter belassen wurde. Es sollte sich dabei für  $p_0$  ein Wert ergeben, der ungefähr der Fixierung (5.16) entspricht und damit diese rechtfertigt. Die entsprechenden Ergebnisse für die Fitparameter sind in Tabelle 5.6 gezeigt. Die zugehörigen Fits sind in Abbildung 5.3 gezeigt. Für den weiteren Verlauf der Rechnung ist mit der Fitfunktion f(x) gearbeitet worden, da diese die Datenpunkte am besten durchläuft.

Der Faktor  $w_k$  ergibt sich gemäß Gleichungen (5.4) aus einem Produkt der Funktionswerte von  $\sigma_{AP}(u)$  bei den verschiedenen Kopplungen  $u_k$  aus Tabelle 5.2. Die Ergebnisse der  $\sigma_{AP}(u_k)$  sind in Tabelle 5.4 eingetragen. Die Ergebnisse des Faktors  $M/\overline{m}(1/L_k)$ , Gleichung (5.11), für die verschiedenen  $u_k$  sind ebenfalls in Tabelle 5.4 eingetragen.

Parameter	f(u)	g(u)	h(u)	i(u)
$p_0$	0.0351152	0.0351152	0.0351152	0.027390836
$p_1$	0.0124856	0.010583	0.0103523	0.020735265
$p_2$	-0.000949492	0	0.00124681	-0.0028166073
$p_3$	0	0	-0.000480785	0

*Tabelle 5.6:* Ergebnisse der Fitparameter für vier verschiedene Fitfunktionen gemäß Gleichung (5.15). Der Wert für  $p_0$ , der bei der Fitfunktion i(u) als Fitparameter belassen wurde, liegt nahe bei dem der Fixierung durch die Bedingung (5.16). Diese scheint also bei den anderen drei Fitfunktionen gerechtfertigt.

Damit kann nun der vollständige Ausdruck

$$\frac{M}{\overline{m}(1/L_{\max})} = w_k^{-1} \times \frac{M}{\overline{m}(1/L_k)}$$
(5.17)

als Produkt der Gleichungen (5.4) und (5.11) für verschiedene k berechnet werden,

$$\frac{M}{\overline{m}(1/L_{\max})} = \sigma_{AP}(u_0) \cdot \ldots \cdot \sigma_{AP}(u_k) \times (2b_0\overline{g}^2)^{-d_0/2b_0} \exp\left\{-\int_0^{\overline{g}} dx \left[\frac{\tau(x)}{\beta(x)} - \frac{d_0}{b_0x}\right]\right\}.$$
(5.18)

Die Ergebnisse für k = 0, ..., 8 sind in Tabelle 5.7 gezeigt. Das Verfahren zur Bestimmung der Unsicherheiten der einzelnen Werte ist in Abschnitt C.2 ausgeführt. Die Werte in Tabelle 5.7 weisen eine hohe Stabilität in k auf. Es kann daher also der Wert für k = 8 als Ergebnis gewählt werden,

$$\frac{M}{\overline{m}(1/L_{\rm max})} = 1.104(29). \tag{5.19}$$

### **5.4 Bestimmung von** $Z_{AP}(g_0, \mu)$ und $Z_M$

Zur Berechnung von  $Z_M(g_0)$ , Gleichung (5.1), muss nun also noch  $Z_{AP}(g_0, \mu)$  bestimmt werden. Die Vorgehensweise dazu folgt der aus [6, 7]. Für drei verschiedene Werte der Kopplung  $\beta$  wurde dazu  $Z_{AP}$  bei verschiedenen Werten von  $\overline{g}^2$  berechnet, Tabelle 5.8. Die Rekursion in der Berechnung des universellen Faktors  $M/\overline{m}$  begann bei einem

k	$u_k$	$M/\overline{m}(1/L_{\rm max})$
0	4.61	1.064
1	3.038(16)	1.117(14)
2	2.346(21)	1.120(20)
3	1.921(20)	1.117(24)
4	1.628(17)	1.114(25)
5	1.413(14)	1.112(27)
6	1.250(12)	1.109(28)
7	1.121(10)	1.106(28)
8	1.018(10)	1.104(29)

*Tabelle 5.7:* Ergebnisse für  $M/\overline{m}(1/L_{max})$  nach Gleichung (5.18) für verschiedene k. Die Berechnung des Fehlers der Werte ist in Abschnitt C.2 beschrieben.

Wert von  $\overline{g}^2(L_{\text{max}}) = 4.61$ , Gleichung (5.18), Tabelle 5.7.  $Z_{\text{AP}}$  soll nun ebenfalls bei  $\overline{g}^2 = 4.61$  ermittelt werden. Dabei ist dieser Wert für die Simulation bei  $\beta = 5.20$  bereits gegeben, wohingegen für die beiden anderen Werte eine Interpolation zu diesem gewünschten Wert vorgenommen werden muss. Gleichung (1.4b) liefert die Motivation zu dem Fitansatz

$$\ln(Z_{\rm AP}) = c_1 + c_2 \ln(\bar{g}^2)$$
 (5.20)

jeweils zwischen den beiden Werten bei Kopplungen größer und kleiner als  $\overline{g}^2 = 4.61$ , wobei  $c_1$  und  $c_2$  die Fitparameter sind. Die Fits sind in Abbildung 5.4 gezeigt. Zusätzlich zum logarithmischen Fit ist jeweils ein linearer Fit

$$\ln(Z_{\rm AP}) = c_1 + c_2 \overline{g}^2 \tag{5.21}$$

zwischen den beiden Punkten durchgeführt worden, die ebenfalls in Abbildung 5.4 gezeigt sind. Die jeweiligen Fitparameter sind in Tabelle 5.9 eingetragen; die Koeffizienten  $c_2$  der logarithmischen Fits liegen ungefähr bei  $d_0/(2b_0) = 0.4138$ , was den Fitansatz (5.20) plausibel erscheinen lässt, vergleiche Gleichung (1.4b).

Vermöge dieser Fits kann nun für  $\beta = 5.29$  und  $\beta = 5.40$  jeweils der Wert für  $Z_{AP}(\overline{g}^2 = 4.61)$  bestimmt werden, siehe Tabelle 5.10. Gemäß Gleichung (5.1) kann schließlich  $Z_M$  als Produkt des universellen Faktors Gleichung (5.19) und des nicht-universellen Fak-



*Abbildung 5.4:* Fits nach Gleichung (5.20) für  $\beta = 5.29$  und  $\beta = 5.40$  zur Bestimmung von  $Z_{AP}$  bei  $\overline{g}^2 = 4.61$ . Zusätzlich zum Fitansatz (5.20), Bezeichnung 'log', ist jeweils ein linearer Fit, (5.21), 'lin', durchgeführt worden. Die Fitparameter sind in Tabelle 5.10 eingetragen.

β	L/a	$\overline{g}^2$	$Z_{AP}$
5.20	4	3.65(3)	1.9126(71)
5.20	6	4.61(4)	2.1117(53)
5.29	4	3.394(17)	1.7858(57)
5.29	6	4.279(37)	1.9404(56)
5.29	8	5.65(9)	2.1117(52)
5.40	4	3.188(24)	1.5621(44)
5.40	6	3.861(34)	1.8076(45)
5.40	8	4.747(63)	1.9391(41)

*Tabelle 5.8:* Werte für  $Z_{AP}$  für verschiedene Kopplungen. Die Werte von  $\overline{g}^2$  stammen aus [8].

Parameter	$\beta = 5.29 \log$	$\beta = 5.40 \log$	$\beta = 5.29 \text{ lin}$	$\beta = 5.40 \text{ lin}$
$c_1$	0.220492	0.132805	0.398907	0.285984
<i>C</i> <sub>2</sub>	0.304329	0.339895	0.0616952	0.0792526

*Tabelle 5.9:* Fitparameter für die Fits (5.20), 'log', und (5.21), 'lin', für  $\beta = 5.29$  und  $\beta = 5.40$ . Die Fits sind in Abbildung 5.4 dargestellt.

β	$Z_{AP}$	Z <sub>M</sub>
5.20	2.1117(53)	2.331(6)(61)
5.29	1.9849(58)	2.191(6)(57)
5.40	1.9198(46)	2.120(5)(55)

*Tabelle 5.10:* Werte für  $Z_{AP}$  und  $Z_M$  gemäß Gleichung (5.1) bei  $\overline{g}^2 = 4.61$  für verschiedene  $\beta$  aus dem Fit (5.20).

tors  $Z_{AP}(\overline{g}^2 = 4.61)$  errechnet werden. Die Werte für  $Z_M$  für  $\beta = 5.20, 5.29, 5.40$  sind ebenfalls in Tabelle 5.10 gezeigt. Der Fehler der  $Z_{AP}$  ist die Summe aus dem statistischen Fehler aus dem Fit und der Differenz zwischen dem Wert aus dem logarithmischen Fit, Gleichung (5.20), und dem aus dem linearen Fit, Gleichung (5.21). Der erste Fehler von  $Z_M$  stammt aus dem Fehler des Faktors  $Z_{AP}$ , der zweite Fehler stammt aus der 2.6%-igen Ungenauigkeit des Wertes von  $M/\overline{m}$ , Gleichung (5.19).

#### 5.5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde der Quarkmassenrenormierungsparameter bestimmt, also der skalenabhängige Faktor, der die Energieabhängigkeit der Quarkmasse beschreibt. Dieser lässt sich nach Gleichung (1.7) als ein Produkt aus zwei Termen darstellen, deren Berechnung in Kapitel 5 ausgeführt wurde. Strukturell folgte dabei die hier verwendete Vorgehensweise der in der ALPHA-Kollaboration entwickelten [6, 7], jedoch wurde abweichend dazu in dieser Arbeit der in Gleichung (1.10) auftretende Faktor  $Z_{AP}$  als ein Faktor über eine Renormierungsbedingung bestimmt, und nicht  $Z_A$  und  $Z_P$  separat.

Die diesem modifizierten Ansatz zugrunde liegende Idee bestand darin, insbesondere im Bereich intermediärer und schwacher Kopplung, möglicherweise eine vergleichbare numerische Genauigkeit erreichen zu können. Der Fehler des universellen Faktors  $M/\overline{m}(1/L_{max})$  in Tabelle 5.7 ist etwas größer als der in der Literatur [6]. In die Berechnung dieses Faktors und damit des Fehlers desselben fließen die Kontinuumsextrapolationen  $\sigma_{AP}$  der Step-Scaling-Funktion ein, vergleiche Tabelle 5.5 und Abbildung 5.2. Wie daraus ersichtlich, ist der Fehler der  $\sigma_{AP}$  bei großen Kopplungen u deutlich größer als der bei kleinen u. Insbesondere die Werte von  $\sigma_{AP}$  bei u = 3.340 und u = 2.4791 weisen dabei einen verhältnismäßig großen Fehler auf. Wird jedoch der Bereich intermediärer Kopplung betrachtet, indem die Rekursion Gleichung (5.5) nicht bei  $u_0 = 4.61$ , wie in Gleichung (5.6), sondern bei niedrigeren Werte von u begonnen wird, so kann der Einfluss der Werte mit großem Fehler gemindert werden, und somit reduziert sich dadurch auch der resultierende Fehler, vergleiche Tabelle 5.11. Dieser ist dann vergleichbar mit dem in der Literatur erhaltenen.

Eine mögliche Anwendung des hier vorgestelleten Verfahrens könnte dann darin bestehen, dass Rechnungen in anderen Renormierungsschemata im Bereich mittlerer Kopplung an den hier benutzten Ansatz anknüpfen, zum Beispiel auch massive Renormierungsschemata [38], indem die Skalenevolution zu höheren Energien dann in diesem Renormierungsschema vorgenommen wird. Weiterhin könnten auch in Zukunft  $N_f = 4$ -Rechnungen über das vewendete Verfahren durchgeführt werden.

Als eine praktische Anwendung der hier durchgeführten Rechnungen kann die Berechnung der RGI-Masse des strange-Quarks vorgenommen worden. Die Strategie dazu folgt der aus [6]. Mit den dort verwendeten Notationen ist zunächst die Referenz-RGI-Masse gegeben durch

$$M_{\rm ref} = Z_{\rm M} m_{\rm ref}; \tag{5.22}$$

k	$u_k$	$M/\overline{m}(1/L_{\max})$		
0	4.61			
1	3.038(16)	1.336(16)		
2	2.346(21)	1.339(23)	1.524(21)	
3	1.921(20)	1.336(23)	1.521(20)	1.683(20)
4	1.628(17)	1.332(22)	1.517(19)	1.679(17)
5	1.413(14)	1.329(21)	1.513(18)	1.675(16)
6	1.250(12)	1.325(22)	1.510(19)	1.671(16)
7	1.121(10)	1.322(23)	1.506(20)	1.667(18)
8	1.018(10)	1.319(24)	1.503(22)	1.663(19)

*Tabelle 5.11:* Ergebnisse für  $M/\overline{m}(1/L_{max})$  nach Gleichung (5.18) für verschiedene k. Anders als für die Berechnung der Werte in Tabelle 5.7, ist die Rekursion aus Gleichung (5.5) hier nicht bei  $u_0 = 4.61$ , Gleichung (5.6), sondern bei niedrigeren Werten von  $u_0$  begonnen worden. Dadurch kann der Fehler in  $M/\overline{m}$  reduziert werden.

Ergebnisse für  $M_{\text{ref}}$  sind in Tabelle 5.12 und in Abbildung 5.5 gezeigt. In der Referenz wird nun aufgrund der deutlichen Cutoff-Effekte auf eine Kontinuumsextrapolation verzichtet; stattdessen wird der Wert des kleinsten  $(a/r_0)^2$  als Ergebnis genommen, also  $M_{\text{ref}} = 72.0(2.7)$  MeV. Mit den hier erhaltenen Daten ist sowohl eine lineare, f(x), als auch ein konstante, g(x), Kontinuumsextrapolation vorgenommen worden; zum Vergleich ist ein linearer Fit der Daten aus der Literatur vorgenommen worden, h(x). Die erhaltenen Fitparameter sind in Tabelle 5.13 eingetragen; die Fits sind in Abbildung 5.5 graphisch gezeigt. Legt man die konstante Kontinuumsextrapolation g(x)zugrunde, so ergibt sich als Ergebnis

$$M_{\rm ref} = 73.4(4.6)(1.9)$$
 MeV. (5.23)

Der erste Fehler in Gleichung (5.23) ist der statistische Fehler, der sich durch die Kontinuumsextrapolation ergibt; zu diesem ist dabei die Abweichung des Ergebnisses vom Wert bei  $\beta = 5.40$  addiert worden. Der zweite Fehler enstammt der Ungenauigkeit von  $M/\overline{m}$ , Gleichung (5.19). Dieses Ergebnis beinhaltet schon eine Kontinuumsextrapolation, weswegen der Fehler separat berücksichtigt wurde, vergleiche Tabelle 5.10. Dieser Wert deckt sich dabei sehr gut mit dem in [6] ermittelten Wert von

β	am <sub>ref</sub>	M <sub>ref</sub> [MeV]	$M_{\rm ref}$ [MeV] aus [6]
5.20	0.01410(30)	70.7(3.6)	58.7(3.2)
5.29	0.01352(28)	70.3(3.4)	63.5(3.2)
5.40	0.01300(18)	76.2(2.4)	72.0(2.7)

*Tabelle 5.12:* Die nach Gleichung (5.22) berechnete Referenzmasse  $M_{ref}$  in MeV für  $r_0 = 0.5$  fm unter Verwendung der Werte von  $r_0/a$  aus [8] und von  $am_{ref}$  aus [6]. Zum Vergleich sind die Ergebnisse für  $M_{ref}$  aus dieser Referenz ebenfalls gezeigt. Vergleiche auch Abbildung 5.5.

Parame	eter	f(x)	g(x)	h(x)
<i>c</i> <sub>1</sub>		85.4	73.4	92.3
<i>c</i> <sub>2</sub>		-473.6	0	-1011.6

*Tabelle 5.13:* Fitparameter für die Fits aus Abbildung 5.5 der Form f, g,  $h(x) = c_1 + c_2 x$ .

 $M_{\rm ref} = 72.0(3)(13)$  MeV.

Mit den ebenfalls in [6] angestellten Überlegungen kann schließlich die RGI-Masse des strange-Quarks über

$$M_{\rm s} \approx \frac{48}{25} M_{\rm ref} \tag{5.24}$$

bestimmt werden. Dieser Vorgehensweise folgend, kann die RGI-Masse des strange-Quarks damit zu

$$M_{\rm s} = 141(9)(4) \,\,{\rm MeV} \tag{5.25}$$

berechnet werden.



Abbildung 5.5: M<sub>ref</sub> für verschiedene (a/r<sub>0</sub>)<sup>2</sup>, Tabelle 5.12. f(x) ist ein linearer Fit durch die Punkte, g(x) ein konstanter Fit. Zum Vergleich sind die Werte aus [6] ebenfalls gezeigt, sowie ein linearer Fit durch diese Punkte, h(x). Die Parameter der Fits sind in Tabelle 5.13 gezeigt.

# Anhang

## **A** Notationen

Lorentz-Indizes der Raumzeit  $\mu$ ,  $\nu$ , ... laufen von 0 bis 3, Indizes k, l, ... sind Raumindizes und laufen über die Raumrichtungen von 1 bis 3. Indizes a, b, ... von Symmetriegruppen laufen über die Menge der Indizes der jeweiligen Gruppe.

## A.1 Dirac-Matrizen

Die Dirac'schen Gamma-Matrizen haben in der chiralen Darstellung folgende Gestalt,

$$\gamma_{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & e_{\mu} \\ e_{\mu}^{\dagger} & 0 \end{pmatrix}. \tag{A.1}$$

Dabei sind die 2 × 2-Matrizen  $e_{\mu}$  durch

$$\mathbf{e}_0 = -\mathbb{1}, \qquad \mathbf{e}_k = \mathbf{i}\,\boldsymbol{\sigma}_k \tag{A.2}$$

gegeben. Hierbei sind

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(A.3)

die Pauli-Matrizen; es ist

$$\left[\sigma_{i},\sigma_{j}\right] = 2\,\mathrm{i}\,\epsilon_{ijk}\sigma_{k}, \qquad \sigma_{i}^{2} = \mathbb{1}. \tag{A.4}$$

Damit gilt nun

$$\gamma^{\dagger}_{\mu} = \gamma_{\mu}, \qquad \left\{\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}\right\} = 2\delta_{\mu\nu}. \tag{A.5}$$

Definiert man

$$\gamma_5 = \gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3, \tag{A.6}$$

60

so ist

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0\\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \tag{A.7}$$

und es gilt

$$\gamma_5 = \gamma_5^{\dagger}, \qquad \gamma_5^2 = 1.$$
 (A.8)

Die hermiteschen Matrizen

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} \left[ \gamma_{\mu}, \gamma_{\nu} \right] \tag{A.9}$$

sind dann durch

$$\sigma_{0k} = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & -\sigma_k \end{pmatrix}, \qquad \sigma_{ij} = -\epsilon_{ijk} \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & -\sigma_k \end{pmatrix}$$
(A.10)

mit dem total antisymmetrischen Tensor  $\epsilon_{ijk}$  gegeben.

## A.2 Generatoren der SU(3)

Der Feldstärketensor der SU(3) ist

$$F^a_{\mu\nu} = \partial_\mu A^a_\nu - \partial_\nu A^a_\mu + g f^{abc} A^b_\mu A^c_\nu, \qquad (A.11)$$

 $a = 1, \ldots, 8$ ., mit dem Eichfeld  $A_{\mu}$ . Dabei ist

$$D_{\mu} = \partial_{\mu} - \mathrm{i}\,g\mathrm{T}^{a}A_{\mu}^{a} \tag{A.12}$$

die kovariante Ableitung.  $f^{abc}$  sind die SU(3)-Strukturkonstanten und T<sup>*a*</sup> die Generatoren mit

$$[\mathbf{T}^a, \mathbf{T}^b] = \mathbf{i} \, \mathbf{f}^{abc} \mathbf{T}^c \tag{A.13}$$

und

$$\mathbf{T}^a = \frac{\lambda^a}{2}.\tag{A.14}$$

Die Gell-Mann-Matrizen  $\lambda_a$  sind gegeben durch

$$\lambda_{k} = \begin{pmatrix} \sigma_{k} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_{4} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_{5} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(A.15)  
$$\lambda_{6} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_{7} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_{8} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

mit den Pauli-Matrizen  $\sigma_k$ , Gleichung (A.3).

## **B** Details zur numerischen Analyse

#### B.1 Struktur der Daten

Der Datensatz, der den Rechnungen dieser Arbeit zugrunde liegt, wurde im Rahmen der Rechnungen zu [6] auf den APE-Rechnern in Zeuthen simuliert und ist wie folgt aufgebaut, vergleiche Tabelle B.1. Für jeden der sechs Werte von u, Tabelle B.2, sind für die drei Gittergrößen L = 6, 8, 12 jeweils die Korrelationsfunktionen  $f_P$ ,  $f_A$ ,  $f_1$ , Gleichungen (3.42), berechnet worden. Dabei sind jeweils verschiedene Messungen durchgeführt und von jeder Messung mehrere Replika erstellt worden. Die Replika stammen daher, dass die zur Simulation verwendeten Rechner in mehrere Partitionen unterteilt wurden, sodass pro Messung mehrere Kopien einer Gitterkonfiguration erstellt und berechnet werden konnten. Daraus ergibt sich eine Gesamtzahl an zur Verfügung stehenden Messwerten. Die Anzahlen der jeweiligen Messungen, Replika und Messwerte für die einzelnen Gitterkonfigurationen sind in Tabelle B.1 gezeigt.

и	L/a	Anzahl Messwerte	Anzahl Messungen	Anzahl Replika
1	6	800	25	32
	12	640	160	4
	8	640	160	4
	16	520	520	1
	12	1600	400	4
	24	700	700	1
	6	1600	50	32
	12	400	100	4
n	8	800	200	4
Ζ	16	560	560	1
	12	1600	400	4
	24	706	706	1
	6	1600	50	32
	12	340	85	4
2	8	480	120	4
3	16	500	500	1
	12	600	150	4
	24	420	420	1
4	6	1568	49	32
	12	648	162	4
	8	396	99	4
	16	749	749	1
	12	720	180	4
	24	488	488	1
	6	960	30	32
	12	400	100	4

и	L/a	Anzahl Messwerte	Anzahl Messungen	Anzahl Replika
	8	560	140	4
	16	500	500	1
	12	1120	280	4
	24	640	640	1
6	6	960	30	32
	12	640	160	4
	8	1200	300	4
	16	570	570	1
	12	772	193	4
	24	660	660	1

Tabelle B.1: Struktur des Datenfiles: Für jede der sechs Kopplungen sind für die jeweils drei Gittergrößen die Korrelationsfunktionen aus Gleichungen (3.42) berechnet worden. Von jeder Messung, Spalte "Anzahl Messungen", sind dabei Replika erstellt worden, Spalte "Anzahl Replika". Aus dem Produkt der beiden ergibt sich die Gesamtzahl der Messwerte.

## **B.2** Berechnung von $Z_{AP}$ und $\Sigma_{AP}$

Die Analyse der Daten ist so durchgeführt worden, dass für jede der sechs Kopplungen u für jede Gittergröße L für die Korrelationsfunktionen  $f_P$ ,  $f_A$  und  $f_1$  jeweils die Werte des ersten Replikums der einzelnen Messungen hintereinander in ein Array eingetragen wurden, dann die Werte des zweiten Replikums der einzelnen Messungen und so weiter, bis alle Datenwerte hintereinander in einem Array stehen. Der Grund für diese Aufteilung der Daten liegt in der Entstehung der Replika. Als Kopien eines Gitters sind die Werte der verschiedenen Replika einer Messung autokorreliert. Durch ein solches Aufteilen der Werte der einzelnen Replika stehen die autokorrelierten Werte im resultierenden Array voneinander getrennt, sodass mögliche Autokorrelationseffekte in diesem Array reduziert werden. Diese Vorgehensweise wurde für jede der Korrelationsfunktionen durchgeführt. Dann wurde für jedes dieser Arrays der Mittelwert mit dem entsprechenden Jackknife-Fehler, Abschnitt B.3, gebildet.

Daraus wurden dann  $Z_{AP}$ , Gleichung (3.46b), und  $\Sigma_{AP}$ , Gleichung (1.22), berechnet. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind in Tabelle B.2 eingetragen.

L/a	β	$u = \overline{g}^2(L)$	$Z_{\rm AP}(g_0,L/a)$	$Z_{\rm AP}(g_0, 2L/a)$	$\Sigma_{\rm AP}(g_0,L/a)$
6	9.5		1.1768(19)	1.2240(20)	1.0401(24)
8	9.7341	0.9793	1.1770(20)	1.2157(20)	1.03291(25)
12	10.05755		1.1997(12)	1.2491(21)	1.04115(20)
6	8.5		1.2085(16)	1.2671(30)	1.04846(28)
8	8.7223	1.1814	1.2306(20)	1.3003(26)	1.05669(28)
12	8.99366		1.2385(14)	1.3112(23)	1.05872(22)
6	7.5		1.2750(22)	1.3363(42)	1.0481(38)
8	7.7206	1.5031	1.2866(34)	1.3867(38)	1.07778(41)
12	8.02599		1.2933(31)	1.3966(36)	1.07985(38)
6	6.6085		1.3500(29)	1.4890(44)	1.10301(40)
8	6.8217	2.0142	1.3731(48)	1.5142(43)	1.10274(50)
12	7.093		1.4040(36)	1.5754(61)	1.1221(52)
6	6.133		1.4350(47)	1.6343(77)	1.13889(66)
8	6.3229	2.4792	1.4456(49)	1.6337(69)	1.13008(61)
12	6.63164		1.4768(33)	1.7058(51)	1.15508(43)
6	5.6215		1.5688(65)	1.8529(79)	1.18114(70)
8	5.8097	3.334	1.6088(50)	1.992(11)	1.2383(78)
12	6.11816		1.6246(52)	1.9663(72)	1.21036(59)

*Tabelle B.2:* Ergebnisse der Rechnungen. Für drei verschiedene Gittergrößen *L* ist für sechs verschiedene Kopplungen  $u Z_{AP}$  für *L* und 2*L* nach Gleichung (3.46b) berechnet worden. Daraus ist dann nach Gleichung (1.22) das Verhältnis  $\Sigma_{AP}$  berechnet worden.

#### B.3 Das Jackknife-Verfahren

Mittels des Jackknife-Verfahrens lässt sich der statistische Fehler eines Datensatzes bestimmen. Es ist für die hier vorliegenden Datensätze aus Monte-Carlo-Simulationen verwendet worden, vergleiche Abschnitt B.1. Ausgehend von einem Datensatz mit *N* Werten einer Größe und dem Mittelwert  $\overline{\rho}$ , bildet man dazu *N* sogenannter Jackknife-Samples, indem man jeweils den *i*-ten Wert des Ausgangssatzes "herausschneidet", daher der Name Jackknife (Klappmesser). Für jedes dieser *N* samples bildet man nun den Mittelwert  $\overline{\rho}_{(i)}$ . Der Jackknife-Fehler des Ausgangsdatensatzes ergibt sich dann gemäß [39]

$$\delta \rho = \sqrt{\frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\overline{\rho}_{(i)} - \overline{\rho}\right)^2}.$$
(B.1)

Für autokorrelierte Datensätze ist der Jackknife-Fehler gegenüber der Standardabweichung zu bevorzugen. Jedes Jackknife-Sample  $\rho_{(i)}$  mit dem Mittelwert  $\overline{\rho}_{(i)}$  enthält fast den gesamten Ausgangsdatensatz, mit Ausnahme des *i*-ten Wertes. Jedes Sample entspricht also einem neuen Monte-Carlo-Mittelwert der Länge N - 1. Diese Einträge des neuen Datensatzes sind nicht unabhängig; es werden vielmehr pseudo-unabhängige "neue" Simulationsergebnisse erzeugt. Man bezeichnet das Jackknife-Verfahren daher auch als Resamplingmethode.

#### **B.4 Werte für** c und $\tilde{c}$

In Tabelle B.3 sind Werte für die Konstanten c und  $\tilde{c}$  aus Gleichungen (3.43) für einige Werte der Gitterauflösung L eingetragen.

L	С	ĩ
4		-0.703059062119885447
6	0.98969662	-0.709476955015178046
8	0.99417664	-0.711773972906251329
10		-0.712848063033681312
12	0.99740297	-0.713434894121966368
14		-0.713790040867106068
16	0.99853742	-0.714021132745180420
18		-0.714179863886127753
20		-0.714293564490488642
22		-0.714377783940186251
24	0.99934941	-0.714441897352913968
26		-0.714491829590545691
28		-0.714531473832190400
30		-0.714563473600449917
32	0.99963393	-0.714589674899747673

*Tabelle B.3:* Werte für c [7] und  $\tilde{c}$  gemäß Gleichungen (3.43) für verschiedene Gitterauflösungen L. Die Werte für  $\tilde{c}$  sind mittels eines geringfügig modifizierten vorhandenen FORTRAN-Programms bestimmt worden und in Übereinstimmung mit [40].

## C Fehlerrechnung

#### C.1 Fehlerrechnung für *u*<sub>k</sub>

In diesem Abschnitt soll der Fehler der Werte  $u_k$ , k = 0, ..., 8 aus Tabelle 5.2 untersucht werden. Die  $u_k$  stammen aus der Rekursion (5.5), die auf der Basis des zugrunde liegenden Fits (5.7) durchgeführt worden ist. Die Eingangsdaten dieses Fits, Tabelle 5.1, sind mit einem Fehler behaftet, sodass der resultierende Fit ebenfalls eine Unsicherheit beinhaltet und damit auch die rekursiv gewonnenen Werte  $u_k$  in Tabelle 5.2. Diesem Umstand wurde durch folgendes Verfahren Rechnung getragen. Der erste Eingangswert aus Tabelle 5.1,  $\sigma(u = 0.9793) = 1.0778$  wurde um seinen Fehler  $\Delta \sigma$  erhöht, während die anderen sieben Werte unverändert gelassen wurden. Nun wurde mit diesem veränderten Wert ein Fit wie in Abschnitt 5.1 beschrieben durchgeführt, anschließend mit dem resultierenden Fit eine Rekursion ebenfalls analog zu der in Abschnitt 5.1. Der hochgestellte Index imax, min bezeichne nun eine Größe, bei der der i-te Wert um seinen Fehler erhöht bzw. erniedrigt worden ist. Es ergeben sich dann Werte für  $u_k^{1\text{max}}, k = 0, \dots, 8$  analog zu denen in Tabelle 5.2. Der Wert k = 0 wurde dabei konstant bei 4.61 belassen. Nun ist der erste Eingangswert aus Tabelle 5.1,  $\sigma(u = 0.9793) = 1.0778$ , um seinen Fehler  $\Delta \sigma$  erniedrigt worden, wobei wieder die anderen sieben Werte unverändert blieben. Auf die gleiche Weise ist dann  $u_k^{1\min}, k = 0, \dots, 8$  berechnet worden. Nun kann

$$\Delta_u^i := (u)^{i\max} - (u)^{i\min} \tag{C.1}$$

definiert werden. Dieses Verfahren ist für alle acht Eingangswerte aus Tabelle 5.1 wiederholt worden. Man erhält also für jedes k = 0, ..., 8 acht Maximum-Minimum-Paare für u, deren Werte in Tabelle C.1 eingetragen sind. Der obere Wert in einem Feld ist dabei der aus dem Maximum-, der untere der aus dem Minimum-Fit. Die Bezeichnung "Eingangswert" meint dabei das jeweilige Maximum-Minimum-Paar, also denjenigen Eingangsdatenpunkt, der um seinen Fehler erhöht respektive erniedrigt wurde. Für k = 0 sind die Einträge dabei konstant, weil der k = 0-Wert unverändert bei  $u_0 = 4.61$ gehalten wurde.
Der Fehler für den *k*-ten Wert von *u* in Tabelle 5.2 ergibt sich dann zu

$$\Delta u_k = \frac{1}{2} \left\{ \left( \Delta_u^1 \right)^2 + \ldots + \left( \Delta_u^8 \right)^2 \right\}^{1/2}.$$
 (C.2)

Da für  $k = 0, u_0 = 4.61$  die Eingangswerte konstant gehalten wurden, ist hier der Fehler null; demzufolge treten in Gleichung (C.2) auch keine 0max, min-Terme auf.

	Eingangswert										
k	1	2	3	4	5	6	7	8			
0	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61			
	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61	4.61			
1	3.04122	3.04097	3.03821	3.03639	3.0383	3.03258	3.02767	3.02714			
	3.03415	3.03441	3.03721	3.03902	3.03711	3.04271	3.04743	3.04893			
2	2.35133	2.35032	2.34565	2.34278	2.34549	2.33634	2.33037	2.34032			
	2.34165	2.34265	2.34727	2.35015	2.34743	2.35668	2.36287	2.35303			
3	1.92392	1.92258	1.91873	1.91644	1.91829	1.91059	1.90618	1.91747			
	1.91801	1.91933	1.92313	1.92546	1.92357	1.9315	1.93628	1.92467			
4	1.62855	1.62717	1.62467	1.62323	1.62406	1.61876	1.61614	1.62554			
	1.62695	1.62832	1.63079	1.63227	1.63141	1.63695	1.6399	1.63011			
5	1.4125	1.41117	1.40985	1.40913	1.40915	1.40595	1.40475	1.41171			
	1.41417	1.41548	1.4168	1.41754	1.4175	1.4209	1.42236	1.41505			
6	1.24802	1.2468	1.24634	1.24615	1.24562	1.244	1.24379	1.24862			
	1.25188	1.2531	1.25355	1.25376	1.25428	1.25606	1.25646	1.25135			
7	1.11884	1.11773	1.11787	1.11805	1.11716	1.11666	1.11713	1.12026			
	1.12406	1.12517	1.12502	1.12485	1.12574	1.12636	1.12603	1.12268			
8	1.01476	1.01376	1.0143	1.01472	1.01362	1.01389	1.01481	1.01667			
	1.02077	1.02177	1.02121	1.0208	1.02191	1.02172	1.02092	1.01888			

*Tabelle C.1:* Werte für *u* aus der im Text beschriebenen Methode. Der obere Wert in einem Feld stammt aus dem jeweiligen Maximum-Fit, der untere aus dem entsprechenden Minimum-Fit. Die Spaltenbezeichnung "Eingangswert" bezeichnet dabei den Eingangsdatenpunkt der Fits aus Tabelle 5.1, der um seinen Fehler erhöht beziehungsweise erniedrigt worden ist.

## C.2 Fehlerrechnung für $M/\overline{m}(1/L_{max})$

Gemäß Gleichung (5.18) gilt

$$\frac{M}{\overline{m}(1/L_{\max})} = \sigma_{AP}(u_0) \cdot \ldots \cdot \sigma_{AP}(u_k) \times (2b_0\overline{g}^2)^{-d_0/2b_0} \exp\left\{-\int_0^{\overline{g}} dx \left[\frac{\tau(x)}{\beta(x)} - \frac{d_0}{b_0x}\right]\right\}$$
(C.3)

mit k = 0, ..., 8. Zur Unsicherheit dieser Größe tragen zunächst die Unsicherheiten der  $u_k$  aus Tabelle 5.2 bei; das Verfahren zur Bestimmung deren Fehler wurde in Abschnitt C.1 beschrieben. Weiterhin jedoch tragen die Faktoren  $\sigma_{AP}(u_0) \cdot ... \cdot \sigma_{AP}(u_k)$  zum Fehler bei. Diese wurden aus dem Fit (5.15), Abbildung 5.3, an den jeweiligen Stellen  $u_k$  entnommen. Die sechs Eingangswerte dieses Fits (5.15), Tabelle 5.5, entstammen ihrerseits aus den Kontinuumsextrapolationen (5.14) und tragen einen Fehler, Tabelle B.2. Um diesen Fehler zu berücksichtigen, wird das gleiche Verfahren benutzt, mit dem in Abschnitt C.1 die Unsicherheiten der  $u_k$  bestimmt wurden. Für jeden der sechs Eingangswerte aus Tabelle 5.5 wurde jeweils ein Maximum- und ein Minimum-Fit durchgeführt, wobei die  $u_k$  dabei auf ihren Mittelwerten, Tabelle 5.2, gehalten wurden. Mit diesen Werten ist dann wie in Abschnitten 5.2 und 5.3 ausgeführt  $(M/\overline{m}(1/L_{max}))^{imax,min}$  für k = 0, ..., 8 berechnet worden. Die Werte für  $M/\overline{m}(1/L_{max})$ , die sich dann aus diesen Fits ergeben, sind in Tabelle C.2 eingetragen. Auch hier bezeichnet der obere Wert in einem Feld das aus dem Maximum-Fit, der untere das aus dem Minimum-Fit stammende Ergebnis.

Analog zu Gleichung (C.1) können dann

$$\Delta_{\rm AP}^{i} := \left(\frac{M}{\overline{m}(1/L_{\rm max})}\right)^{i\max} - \left(\frac{M}{\overline{m}(1/L_{\rm max})}\right)^{i\min} \tag{C.4}$$

definiert werden, wobei der Index AP bedeutet, dass hier die Eingangswerte für den Fit  $\sigma_{AP}(u)$  verändert wurden, und nicht, wie in Abschnitt C.1, die für den Fit  $\sigma(u)$ . Der gesamte Fehler der Größen in Gleichung (C.3) ergibt sich dann für k = 0, ..., 8 unter Berücksichtigung der Fehler der  $u_k$ , Abschnitt C.1, zu

$$\Delta \sigma_{\rm AP} = \frac{1}{2} \left\{ \left( \Delta_u^1 \right)^2 + \ldots + \left( \Delta_u^8 \right)^2 + \left( \Delta_{\rm AP}^1 \right)^2 + \ldots + \left( \Delta_{\rm AP}^6 \right)^2 \right\}^{1/2}.$$
 (C.5)

	Eingangswert									
k	1	2	3	4	5	6				
0	1.0637	1.0637	1.0637	1.0637	1.0637	1.0637				
	1.0637	1.0637	1.0637	1.0637	1.0637	1.0637				
1	1.11805	1.11825	1.11612	1.11468	1.11302	1.10508				
	1.11676	1.11655	1.11868	1.12014	1.12181	1.13000				
2	1.12036	1.11946	1.1165	1.11569	1.11373	1.10346				
	1.11985	1.12076	1.12373	1.12455	1.12654	1.13716				
3	1.11702	1.11485	1.11156	1.11182	1.10997	1.09927				
	1.11774	1.11993	1.12325	1.12298	1.12486	1.13595				
4	1.11339	1.11004	1.10661	1.10799	1.10638	1.09593				
	1.11535	1.11873	1.12219	1.1208	1.12244	1.13328				
5	1.11002	1.10562	1.10217	1.10456	1.10322	1.09329				
	1.1131	1.11754	1.12105	1.11862	1.11999	1.1303				
6	1.10687	1.10157	1.09812	1.10143	1.10035	1.09102				
	1.11095	1.11631	1.11982	1.11646	1.11756	1.12725				
7	1.10389	1.0978	1.09439	1.09849	1.09767	1.08894				
	1.10884	1.115	1.11848	1.1143	1.11515	1.12422				
8	1.10103	1.09427	1.0909	1.0957	1.09511	1.08696				
	1.10676	1.11361	1.11705	1.11215	1.11276	1.12124				

*Tabelle C.2:* Werte für  $M/\overline{m}(1/L_{max})$  aus der im Text beschriebenen Methode. Der obere Wert in einem Feld stammt aus dem jeweiligen Maximum-Fit, der untere aus dem entsprechenden Minimum-Fit. Die Spaltenbezeichnung "Eingangswert" bezeichnet dabei den Eingangsdatenpunkt der Fits aus Tabelle 5.5, der um seinen Fehler erhöht beziehungsweise erniedrigt worden ist.

## Literaturverzeichnis

#### [1] particle data group

pdg.lbl.gov

#### [2] T. Muta

Foundations Of Quantum Chromodynamics: An Introduction to Perturbative Methods in Gauge Theories *World Scientific Publishing Company, Singapur* (2009)

#### [3] M. Lüscher, P. Weisz und U. Wolff

A numerical method to compute the running coupling in asymptotically free theories

Nucl. Phys. B359 (1991) 221

#### [4] M. Lüscher

Advanced Lattice QCD Lectures given at the Les Houches Summer School "Probing the Standard Model of Particle Interactions", July 28 – September 5, 1997 hep-lat/9802029

### [5] R. Sommer

Non-perturbative QCD: renormalization, O(a)-improvement and matching to Heavy Quark Effective Theory Lectures given at ILFTN Workshop on Perspectives in Lattice QCD, Nara, Japan, 31 Oct - 11 Nov 2005 hep-lat/0611020

## [6] M. Della Morte, U. Rolff, R. Hoffmann, F. Knechtli, J. Rolf, R. Sommer, I. Wetzorke und U. Wolff

Non-perturbative quark mass renormalization in two-flavor QCD Nucl. Phys. B729 (2005) 117-134 hep-lat/0507035

- S. Capitani, M. Lüscher, R. Sommer und H. Wittig Non-perturbative quark mass renormalization in quenched lattice QCD *Nucl. Phys. B544 (1999) 669-698* hep-lat/9810063
- [8] M. Della Morte, R. Frezzotti, J. Heitger, J. Rolf, R. Sommer und U. Wolff Computation of the strong coupling in QCD with two dynamical flavours *Nucl. Phys. B713* (2005) 378-406 hep-lat/0411025

## [9] M. Lüscher, S. Sint, R. Sommer und P. Weisz Chiral symmetry and O(a) improvement in lattice QCD Nucl. Phys. B478 (1996) 365-400 hep-lat/9605038

### [10] M. Guagnelli, R. Petronzio, J. Rolf, S. Sint, R. Sommer und U. Wolff

Non-perturbative results for the coefficients  $b_m$  and  $b_a - b_p$  in O(a) improved lattice QCD *Nucl. Phys.* B595 (2001) 44-62

hep-lat/0009021

## [11] S. Sint und P. Weisz

Further results on *O*(*a*) improved lattice QCD to one-loop order of perturbation theory *Nucl. Phys. B502* (1997) 251-268 hep-lat/9704001

## [12] I. Montvay und G. Münster

Quantum Fields on a Lattice *Cambridge University Press, Cambridge (1997)* 

## [13] G. Münster und M. Walzl

Lattice Gauge Theory - A short Primer Lectures given at the PSI Zuoz Summer School 2000 hep-lat/0012005

## [14] K. G. Wilson

Phys. Rev. D10 (1974) 2445

#### [15] C. Gattringer und C. B. Lang

Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation *Springer, Heidelberg* (2009)

- [16] **K. Symanzik** Nucl. Phys. B226 (1983) 187
- [17] **K. Symanzik** Nucl. Phys. B226 (1983) 205

#### [18] B. Sheikholeslami und R. Wohlert

Improved Continuum Limit Lattice Action for QCD with Wilson Fermions *Nucl.Phys.* B259 (1985) 572

[19] **R. Wohlert** 

Improved continuum limit lattice action for quarks DESY 87-069, 1987

#### [20] M. Lüscher, S. Sint, R. Sommer, P. Weisz und U. Wolff

Non-perturbative *O*(*a*) improvement of lattice QCD *Nucl. Phys.* B491 (1997) 323-343 hep-lat/9609035

#### [21] K. Jansen und R. Sommer

*O*(*a*) improvement of lattice QCD with two flavors of Wilson quarks *Nucl. Phys. B530* (1998) 185-203 hep-lat/9803017

#### [22] L. Maiani und G. Martinelli

Current Algebra and Quark Masses from a Monte Carlo Simulation with Wilson Fermions

Phys. Lett. B178 (1986) 265

#### [23] M. Lüscher, R. Narayanan, P. Weisz und U. Wolff

The Schrödinger Functional - a Renormalizable Probe for Non-Abelian Gauge Theories

*Nucl. Phys. B384* (1992) 168-228 hep-lat/9207009

#### [24] M. Lüscher, R. Sommer, P. Weisz und U. Wolff

A Precise Determination of the Running Coupling in the SU(3) Yang-Mills Theory

*Nucl. Phys. B413* (1994) 481-502 hep-lat/9309005

## [25] S. Sint

On the Schroedinger functional in QCD Nucl. Phys. B421 (1994) 135-158 hep-lat/9312079

## [26] M. Lüscher und P. Weisz

*O*(*a*) improvement of the axial current in lattice QCD to one-loop order of perturbation theory *Nucl. Phys.* B479 (1996) 429-458 hep-lat/9606016

## [27] M. Della Morte, R. Hoffmann und R. Sommer

Non-perturbative improvement of the axial current for dynamical Wilson fermi-

ons JHEP 0503:029, 2005 hep-lat/0503003

## [28] C. G. Callan

Phys. Rev. D2 (1970) 1541

## [29] K. Symanzik

Commun. Math. Phys. 18 (1970) 227

## [30] S. Sint und P. Weisz

The running quark mass in the SF scheme and its two-loop anomalous dimension *Nucl. Phys. B545 (1999) 529-542* hep-lat/9808013

## [31] A. Bode, P. Weisz und U. Wolff

Two Loop Computation of the Schrödinger Functional in Lattice QCD *Nucl. Phys. B576 (2000) 517-539* hep-lat/9911018

## [32] S. Sint und R. Sommer

The running coupling from the QCD Schrödinger functional – a one-loop analysis *Nucl. Phys. B465 (1996) 71-98* hep-lat/9508012

## [33] E. Gabrielli, G. Martinelli, C. Pittori, G. Heatlie und C. Sachrajda

Renormalization of lattice two fermion operators with improved nearest neighbor action

Nucl.Phys. B362 (1991) 475-486

#### [34] **D. Hesse**

The quark mass  $m_Q$  and its Two Loop Anomalous Dimension *Interne Notizen* (2010)

#### [35] M. Kurth

Non-Perturbative Renormalization of the B-Meson Axial Current *Dissertation, Humboldt-Universität Berlin* (2000)

#### [36] M. Lüscher und P. Weisz

Efficient numerical techniques for perturbative lattice gauge theory computations *Nucl. Phys. B266 (1986) 309* 

## [37] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling Numerical Recipes in C

Cambridge University Press, Cambridge (1988)

#### [38] D. Hesse

Eine Strategie zur nichtstörungstheoretischen Fixierung der schweren Quarkmasse in B-Meson-Systemen *Diplomarbeit, WWU Münster (2008)* 

#### [39] K. Rummukainen

Monte Carlo simulation methods
http://cc.oulu.fi/~tf/tiedostot/pub/montecarlo/

#### [40] **D. Hesse**

Persönliche Mitteilungen (2010)

#### [41] P. Fritzsch

Nicht-perturbative Renormierung des statischen Axialstromes mit zwei dynamischen Quarkflavours Diplomarbeit, WWU Münster (2005)

### [42] J. Wennekers

Nicht-perturbative Untersuchungen an einem System von leichten und schweren

Quarks in kleinem Volumen Diplomarbeit, WWU Münster (2003)

### [43] H. Bilz

Elementarteilchen *Umschau Verlag, Frankfurt am Main (1961)* 

## [44] H. J. Rothe

Lattice Gauge Theories: An Introduction World Scientific Publishing Company, Singapur (2005)

## [45] J. Smit

Introduction to Quantum Fields on a Lattice *Cambridge University Press, Cambridge (2002)* 

## [46] O. Nachtmann

Phänomene und Konzepte der Elementarteilchenphysik Vieweg, Braunschweig (1986)

## [47] T. Degrand und C. DeTar

Lattice Methods for Quantum Chromodynamics World Scientific Publishing Company, Singapur (2006)

## [48] M. Böhm, A. Denner und H. Joos

Gauge Theories of the Strong and Electroweak Interaction *Teubner Verlag, Stuttgart* (2001)

## Danksagung

So: Das wars. Vielen Dank für die Aufmerksamkeit. Besonderer Dank geht derweil an

- de meine Familie,
- Im PD Dr. Jochen Heitger f
  ür die intensive Unterst
  ützung bei meiner Arbeit und die interessante Aufgabenstellung,
- Prof. Gernot Münster und Jochen Heitger für die angenehme Atmosphäre in der Arbeitsgruppe,
- 🗄 Alex, Jan, Teo, Sammy, Tobi, Kai und Toast für die Zeit in diversen Büros,
- gaaanz speziell Kaichen und Toastilein für die Professionalität im Umgang mit meiner Inkompetenz,

Ende.

Еснт јеттт.

# Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, diese Diplomarbeit selbstständig angefertigt und keine als die angegeben Hilfsmittel verwendet zu haben.

Felix Bahr Münster, 08. Februar 2011