

Diplomarbeit

Chirale Störungstheorie für Twisted-Mass Gitter-QCD

Peter Hofmann

11. November 2005

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für Theoretische Physik

Diese korrigierte Version unterscheidet sich nur geringfügig von der am 11. November 2005 im Prüfungssekretariat vorgelegten Arbeit. Es wurden insgesamt drei kleine Druckfehler in den Abschnitten 1.2.2, 1.4.2 und 3.7.1 korrigiert.

Münster, den 18. Dezember 2005

Inhaltsverzeichnis

1	Grundlagen	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Grundlagen der QCD	3
1.2.1	Grundbegriffe der Quantenfeldtheorie	3
1.2.2	Die Lagrange-Dichte der QCD	6
1.3	Gitter-QCD	9
1.3.1	Die Wirkung der Gitter-QCD	9
1.3.2	Partiell gequenchte QCD	11
1.4	Chirale Störungstheorie	12
1.4.1	Effektive Feldtheorien	13
1.4.2	Chirale Störungstheorie im Kontinuum	15
1.4.3	Chirale Störungstheorie für die Gitter-QCD	19
1.4.4	Axial gedrehter Massenterm	21
1.4.5	Berechnung der Pion-Massen in führender Ordnung	22
1.5	Partiell gequenchte Chirale Störungstheorie	24
1.5.1	Symmetriegruppe	24
1.5.2	Parametrisierung der Felder	25
1.5.3	Lagrange-Dichte bis $\mathcal{O}(p^4)$	25
2	Berechnung der Pion-Massen bis $\mathcal{O}(p^4)$	29
2.1	Bestimmung des Minimums der Lagrange-Dichte durch Entwicklung von \mathcal{L}_χ nach den Pion-Feldern	30
2.2	Direkte Bestimmung des Minimums von \mathcal{L}_χ	30
2.3	Tree-Level Pion-Massen	33
2.4	Schleifenbeiträge zu den Pion-Massen	36
2.4.1	Übliche Parametrisierung der Felder	36
2.4.2	Reparametrisierung der Felder	43
2.4.3	Ergebnisse für die Pion-Massen	44

3 Auswertung der Gitter-QCD Simulation	47
3.1 Definitionen	47
3.1.1 Twisted-Basis	47
3.1.2 Physical-Basis	48
3.1.3 Zusammenhang der Basis-Darstellungen	48
3.2 Verhalten am Phasenübergang	50
3.2.1 Diskontinuität in der Vakuumorientierung	51
3.2.2 Gültigkeitsbereich von $\eta \ll 1$ und Phasenübergang	52
3.2.3 Implikationen für die Auswertung der Simulation	53
3.2.4 Überprüfung der Gültigkeit des Power-Countings bis $\mathcal{O}(p^4)$	54
3.3 Pion-Massen in der Nähe des Phasenübergangs	56
3.3.1 Ergebnisse in der Physical-Basis	56
3.3.2 Ergebnisse in der Twisted-Basis	58
3.4 Messgrößen der Simulation in $t m \chi$ PT	59
3.4.1 Drehwinkel in der Twisted-Basis	59
3.4.2 Pion-Massen in der Twisted-Basis	60
3.4.3 Pion-Zerfallskonstante in der Twisted-Basis	61
3.4.4 PCAC-Quark-Masse	62
3.4.5 Pion-Massen als Funktion von χ'_{PCAC}	63
3.4.6 Pion-Zerfallskonstanten als Funktion von χ'_{PCAC} bis $\mathcal{O}(a)$	64
3.5 Analyse der Simulationsergebnisse	65
3.5.1 χ^2 -Fit Probleme	65
3.5.2 Generalized-Least-Squares	65
3.5.3 Abschätzung der Unsicherheiten der Fit-Parameter	67
3.5.4 χ^2 -Fit als Spezialfall des Generalized-Least-Squares-Fit	67
3.5.5 Simultaner χ^2 -Fit für mehrere Funktionen	68
3.5.6 Implementierung der Fit-Methoden	70
3.6 Fit-Ergebnisse	73
3.6.1 Renormierung auf dem Gitter	73
3.6.2 Pion-Massen als Funktion von χ'_{PCAC}	74
3.6.3 Pion-Zerfallskonstante f_π als Funktion von χ'_{PCAC}	75
3.6.4 Pseudoskalares Matrixelement g_π als Funktion von χ'_{PCAC}	75
3.6.5 PCAC-Quark-Masse als Funktion von $a m_0$	77
3.6.6 Pion-Masse als Funktion von $a m_0$	78
3.6.7 Pion-Zerfallskonstante f_π als Funktion von $a m_0$	78
3.6.8 Pseudoskalares Matrixelement g_π als Funktion von $a m_0$	79
3.6.9 Fit-Resultate für die Messgrößen als Funktion $a m_{PCAC}$	80

3.6.10	Fit-Resultate für die Messgrößen als Funktion von $a m'_0$	87
3.6.11	Gemeinsamer Fit für alle Messgrößen	92
3.6.12	Gemeinsamer Fit für alle Messgrößen mit $Z_A = 0.952$	97
3.7	Fit mit physikalischen Parametern	102
3.7.1	Größe der Gitterkonstante a	104
3.7.2	Fit für $\beta = 0,67$ und $\mu = 0,01$ mit m_χ^{PCAC}	104
3.7.3	Fit für $\beta = 0,67$ und $\mu = 0,01$	108
3.7.4	Fit für $\beta = 0,67$ mit $\mu = 0,01$ und $\mu = 0$	111
3.7.5	Fit für $\beta = 0,74$ und $\mu = 0,0075$	115
3.7.6	Fit für $\beta = 0,74$ mit $\mu = 0,0075$ und $\mu = 0$	117
3.7.7	Fit für $\beta = 0,67$, $\beta = 0,74$ und $\mu = 0,01$, $\mu = 0,0075$	121
3.7.8	Fit für $\beta = 0,67$, $\beta = 0,74$ und $\mu = 0,01$, $\mu = 0,0075$ und $\mu = 0$	126
3.7.9	Bestimmung des Renormierungsfaktors Z_A	133
3.7.10	Fit für positive Werte von $a m_\chi^{PCAC}$	137
3.7.11	Fit für $\beta = 0.67$ und $\beta = 0.74$ bis $\mathcal{O}(a^2)$	151
3.8	Zusammenfassung	160
4	Partiell gequenchte Chirale Störungstheorie	163
4.1	Tree-Level Mesonen-Massen	164
4.1.1	Lagrange-Dichte	164
4.1.2	Die Generatoren der $SU(4 2)$	165
4.1.3	Bestimmung des Minimums des Potentials	166
4.1.4	Tree-Level Ergebnisse für die Goldstone-Bosonen-Massen	167
4.2	Loop-Rechnungen	170
4.2.1	Loop-Beiträge zu den Massen	170
4.3	NLO-Mesonen-Massen bis $\mathcal{O}(a^2)$	172
5	Zusammenfassung und Ausblick	175
A	Konventionen	177
A.1	Einheiten	177
A.2	Summenkonvention	177
A.3	Spur und Superspur einer Matrix	178
B	Die $SU(N)$-Generatoren	179
B.1	Die Generatoren der $SU(2)$	179
B.2	Die Generatoren der $SU(3)$	180
C	Dirac-Matrizen	181

D Renormierung	183
E Renormierungsfaktoren auf dem Gitter	185
F Datensatz	187

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Einleitung

Nach heutigem Wissen gibt es in der Natur vier fundamentale Kräfte: die *Gravitation*, die *Elektromagnetische Wechselwirkung* sowie die *Starke-* und die *Schwache Kraft*. Mit Ausnahme der Gravitation, die durch die Allgemeine Relativitätstheorie beschrieben wird, lassen sich diese Wechselwirkungen mit dem sogenannten *Standardmodell* der Elementarteilchenphysik konsistent beschreiben. Die Grundlage für das Standardmodell bilden die Ideen der *Quantenfeldtheorie*, in der sämtliche Teilchen als Anregungen quantisierter Felder betrachtet werden.

Ein wesentlicher Bestandteil des Standardmodells ist die *Quantenchromodynamik* (QCD), die die Phänomene im Zusammenhang mit der Starken Wechselwirkung beschreibt. Die grundlegenden Freiheitsgrade der QCD sind die sogenannten *Quarks* und die *Gluonen*, die als Eichbosonen für die Vermittlung der Starken Wechselwirkung verantwortlich sind. Gebundene Zustände von Quarks werden auch als *Hadronen* bezeichnet, zu denen unter anderem Protonen und Neutronen gehören. Diese wiederum machen, gebunden zu Atomkernen, den größten Teil der uns umgebenden Materie aus.

Im Gegensatz zur QCD sind die Theorien der Elektromagnetischen- und der Schwachen Wechselwirkung mathematisch vergleichsweise gut zu handhaben, wogegen die Berechnung von Prozessen der Starken Wechselwirkung ungleich komplexer ist. Die Ursache für die enormen Schwierigkeiten, aus der QCD experimentell überprüfbare Aussagen abzuleiten, liegt in der nicht-abelschen Natur der zugrunde liegenden SU(3)-Eichsymmetrie. Dadurch kommt es zu Wechselwirkungen zwischen den Gluonen, wodurch die Stärke der Kopplung energieabhängig wird. Während die Kopplung bei Prozessen mit hohem Energieübertrag asymptotisch verschwindet, wächst sie im Grenzfall niedriger Energien auf Werte der Größenordnung von Eins, wodurch das Phänomen des sogenannten Farb-Confinements auftritt. In der Natur werden keine isolierten Quarks beobachtet, da die Energie, die zu ihrer Trennung aufgewendet werden muss, bereits so groß ist, dass eine Vielzahl neuer Teilchen entstehen kann, die sich sofort wieder zu farb-neutralen Hadronen verbinden. Aus diesem Grund ist es auch

nötig, einen nicht störungstheoretischen Ansatz zur Behandlung der Phänomene der QCD bei niedrigen Energien zu verwenden.

Besonders vielversprechend erscheint es derzeit, eine Doppelstrategie zu verfolgen. Mit Hilfe numerischer Methoden versucht man zunächst, möglichst präzise Ergebnisse wichtiger Teilcheneigenschaften zu erhalten, wie beispielsweise die Massen oder die Zerfallskonstanten der leichtesten Hadronen. Um aber zusätzlich Erklärungskraft zu gewinnen, ist es nötig, gleichzeitig die theoretischen Methoden zu verfeinern. Im Limes niedriger Energien und kleiner Quark-Massen erweist sich die *Chirale Störungstheorie* als ausgesprochen erfolgreich in der Beschreibung der wichtigsten Phänomene. Als eine *Effektive Feldtheorie* ist sie die ideale Ergänzung zu numerischen Untersuchungen der Niederenergie-QCD, da sich alle freien Parameter der Chiralen Störungstheorie im Prinzip aus den Simulationsdaten extrahieren lassen. Mit einer immer präziseren Kenntnis dieser Konstanten ist es dann wiederum möglich, immer genauere Vorhersagen über die Niederenergiedynamik der QCD zu machen.

In diesem ersten Kapitel folgt nun eine Einführung in die wesentlichen Konzepte, die zum Verständnis dieser Arbeit notwendig sind. Dabei werden vor allem die theoretischen Aspekte ausführlich erläutert, die für die hier durchgeführten Rechnungen eine besondere Bedeutung haben.

1.2 Grundlagen der QCD

1.2.1 Grundbegriffe der Quantenfeldtheorie

Um die Grundlagen der Quantenfeldtheorie zu erläutern, bietet es sich an, zunächst ein konkretes Beispiel einer solchen Theorie zu untersuchen. Im folgenden werden vor allem die Konzepte skizziert, die für diese Arbeit von besonderer Bedeutung sind.

Ein ausgesprochen einfacher Fall ist die sogenannte ϕ^4 -Theorie, deren Lagrange-Dichte neben dem sogenannten kinetischen Term und dem Massenterm eine ϕ^4 -Wechselwirkung enthält.

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 - \frac{\lambda}{4!} \phi^4 \quad (1.1)$$

Freie Theorie

Bei verschwindender Wechselwirkung, also bei $\lambda = 0$, ergibt sich als Spezialfall die Klein-Gordon Lagrange-Dichte des freien Skalarfeldes und die folgende Bewegungsgleichung :

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \phi = 0 \quad (1.2)$$

Anders als in einer klassischen Feldtheorie handelt es sich hier bei $\phi(\mathbf{x})$ und $\pi(\mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\mathbf{x})}$ um Operatoren, die die kanonischen Vertauschungsrelationen erfüllen :

$$[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})] = i\delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.3)$$

$$[\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}')] = [\pi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x}')] = 0 \quad (1.4)$$

Mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren a und a^\dagger mit ;

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}^\dagger] = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (1.5)$$

und der Abkürzung

$$\omega_{\mathbf{p}} = \sqrt{|\mathbf{p}|^2 + m^2} \quad (1.6)$$

lässt sich die Lösung nach ebenen Wellen entwickeln :

$$\phi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{p}}}} (a_{\mathbf{p}} + a_{-\mathbf{p}}^\dagger) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \quad (1.7)$$

$$\pi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} (-i) \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{p}}}{2}} (a_{\mathbf{p}} - a_{-\mathbf{p}}^\dagger) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \quad (1.8)$$

Euklidische Formulierung und Funktionalintegral Darstellung

Neben einer Formulierung der Quantenfeldtheorie im Minkowski-Raum mit der Metrik

$$g_{\mu\nu}^{(M)} = \text{diag}(1, -1, -1, -1) \quad (1.9)$$

gibt es noch die sogenannte Euklidische Formulierung, die vor allem im Zusammenhang mit Gitter-Rechnungen viele Vorteile hat :

$$g_{\mu\nu}^{(E)} = \text{diag}(1, 1, 1, 1) \quad (1.10)$$

Der Übergang von der Minkowski-Metrik zur Euklidischen Metrik geschieht durch eine Wick-Rotation und entspricht folgender Ersetzung :

$$t^{(M)} \rightarrow -i t \quad (1.11)$$

Die Lagrange-Dichte lautet nun in der Euklidischen Formulierung :

$$\mathcal{L}^{(E)} = \frac{1}{2} (\partial_\mu^E \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi^4 \quad (1.12)$$

Im folgenden wird, soweit nicht anders vermerkt, durchgehend mit der Euklidischen Metrik gearbeitet, so dass auf den Index „E“ verzichtet wird. Mit Hilfe der Funktionalintegraldarstellung lassen sich die Greenschen- oder auch kurz n-Punkt-Funktionen nun auf einfache Weise angeben :

$$G^{(n)}(x_1, \dots, x_n) \equiv \langle \phi(x_1), \dots, \phi(x_n) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \dots \phi(x_n) e^{-S[\phi]} \quad (1.13)$$

mit der Euklidischen Wirkung $S = \int d^4x \mathcal{L}$ und dem Faktor $Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}$. Das Integrationsmaß des Funktionalintegrals lautet $\mathcal{D}\phi = \prod_x d\phi(x)$. Besonders kompakt ist die Darstellung der n-Punkt-Funktionen mit Hilfe des erzeugenden Funktionalen :

$$\begin{aligned} Z[J] &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi e^{-S+(J,\phi)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^4x_1 \dots d^4x_n J(x_1) \dots J(x_n) \langle \phi(x_1), \dots, \phi(x_n) \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

mit $(J, \phi) \equiv \int d^4x J(x) \phi(x)$ und $Z[J] \equiv \langle e^{(J,\phi)} \rangle$ sowie $Z[0] = 1$. Damit folgt für die n-Punkt Funktionen :

$$G^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \left. \frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)} \right|_{J=0} \quad (1.15)$$

Wechselwirkungen

Der Wechselwirkungsterm $\mathcal{L}_i = \frac{\lambda}{4!} \phi(x)^4$ lässt sich nun für ausreichend kleines λ störungstheoretisch behandeln. Entwickelt man $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_i$ wobei $\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2$ die Lagrange-Dichte der freien Theorie beschreibt, in \mathcal{L}_i , so erhält man für die n-Punkt-Funktion in der ϕ^4 Theorie :

$$\langle \phi(x_1), \dots, \phi(x_n) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0} \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \left\{ 1 - \frac{\lambda}{4!} \int d^4x \phi(x)^4 + \dots \right\} \quad (1.16)$$

Damit folgt nun :

$$\langle \phi(x_1), \dots, \phi(x_n) \rangle = \left(\frac{Z}{Z_0} \right)^{-1} \frac{1}{Z_0} \left\langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \left\{ 1 - \frac{\lambda}{4!} \int d^4x \phi(x)^4 + \dots \right\} \right\rangle_0 \quad (1.17)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{Z}{Z_0} &= \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0} \left\{ 1 - \frac{\lambda}{4!} \int d^4x \phi(x)^4 + \dots \right\} \\ &= \left\langle 1 - \frac{\lambda}{4!} \int d^4x \phi(x)^4 + \dots \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (1.18)$$

wobei der Index „0“ kennzeichnet, dass es sich um Größen der freien Theorie handelt. Ein geeignetes Mittel, um diese Rechnungen zu vereinfachen, sind die bekannten Feynman-Diagramme, mit deren Hilfe sich die einzelnen Terme in der Entwicklung des Funktionalintegrals visualisieren lassen. Für den Fall der ϕ^4 -Theorie lauten die Feynman-Regeln im Orts- beziehungsweise im Impulsraum :

Ortsraum	Impulsraum
 $\hat{=} \Delta(x-y)$	 $\hat{=} \frac{1}{p^2+m^2}$
 $\hat{=} -g \int d^4x$	 $\hat{=} -g (2\pi)^4 \delta^4(p_1+p_2+p_3+p_4)$

Zu beachten ist hier zusätzlich der Symmetriefaktor S^{-1} , wobei S die Anzahl der Permutationen innerer Linien und Punkte bezeichnet, die den Graphen auf sich selbst abbilden. Beispiele für die Anwendung dieser Regeln finden sich in den Abschnitten über die Berechnung der Loop-Beiträge zu den Pion-Massen. Es müssen jedoch zusätzlich die Regeln für den Fall mehrkomponentiger Felder mit Ableitungs-Kopplungen berücksichtigt werden, was im folgenden kurz zusammengefasst wird.

Mehrkomponentige Felder

Die oben skizzierten Feynman-Regeln lassen sich natürlich auch auf den Fall mehrkomponentiger Felder erweitern, die beispielsweise in der Chiralen Störungstheorie auftreten. Auch an dieser Stelle werden die wesentlichen Konzepte anhand eines Beispiels skizziert. Die Euclidische Wirkung für das „O(n) symmetrische lineare σ -Modell“ lautet :

$$S = \frac{1}{2} \int d^4x \left\{ \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi_i) (\partial_\mu \phi_i) + \frac{m^2}{2} \phi_i \phi_i + \frac{\lambda}{4!} (\phi_i \phi_i)^2 \right\} \quad (1.19)$$

wobei $\vec{\phi} = (\phi_i)$ mit $i \in \{1, \dots, n\}$ ein n-komponentiges reelles Skalarfeld ist. In diesem Fall wird der Wechselwirkungsterm zunächst in einer vollständig symmetrisierten Form notiert :

$$(\phi_i \phi_i)^2 = S_{ijkl} \phi_i \phi_j \phi_k \phi_l \quad (1.20)$$

mit

$$S_{ijkl} = \frac{1}{3} (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (1.21)$$

Die Feynman-Regeln lauten beispielsweise für die ϕ^4 -Wechselwirkung im Ortsraum :

Ortsraum

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} \text{i} \\ \bullet - - - \bullet \\ \text{x} \qquad \text{y} \end{array} & \hat{=} & \Delta_{ij}(x-y) \\[10pt] \begin{array}{c} \text{i} \\ \times \\ \text{j} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{l} \qquad \text{k} \end{array} & \hat{=} & -g S_{ijkl} \int d^4x \end{array}$$

wobei hier über die Indizes geeignet zu summieren ist. Analoge Regeln gelten natürlich auch wieder für die Darstellung im Impulsraum.

Ableitungs-Kopplungen

In Eichtheorien, wie beispielsweise in der QCD, können auch Kopplungen wie $f_{ijk}\partial_\mu A_\nu^i A_\mu^j A_\nu^k$ auftreten, die Ableitungen der Felder enthalten. Ein Beispiel hierfür ist folgende Wechselwirkung, die in der Chiralen Störungstheorie vorkommt :

$$S_I = \frac{\lambda}{3!} \int d^4x (\partial_\mu\phi)(\partial_\mu\phi)\phi \quad (1.22)$$

Betrachtet man nun einen Erwartungswert der Form :

$$\left\langle \phi(x_1)\phi(x_2)\phi(x_3)\left(-\frac{\lambda}{3!}\right) \int d^4w (\partial_\mu\phi(w))(\partial_\mu\phi(w))\phi(w) \right\rangle_0 \quad (1.23)$$

so ergibt dies die wichtige Regel, dass aus der Differentiation im Ortsraum, der Faktor $(-ip_\mu)$ im Impulsraum resultiert :

$$\frac{\partial}{\partial w_\mu} \Delta(x-w) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} (-ip_\mu) \frac{e^{ip(x-w)}}{p^2 + m^2} \quad (1.24)$$

Damit folgt beispielsweise :

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} \diagup \\ \bullet \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & -\frac{\lambda}{3} (-i)^2 (p_1 p_2 + p_2 p_3 + p_3 p_1) (2\pi)^4 \delta(p_1 + p_2 + p_3) \end{array}$$

1.2.2 Die Lagrange-Dichte der QCD

SU(3) Symmetriegruppe

Im Rahmen der Quantenchromodynamik spielt die Symmetriegruppe SU(3) eine entscheidende Rolle. Zum einen handelt es sich bei der SU(3) um die Eichgruppe der QCD, zum anderen

wird in der Natur im Hadronenspektrum eine approximativ realisierte SU(3)-Symmetrie beobachtet. Das bedeutet, dass man die Hadronen näherungsweise degenerierten Multiplets zuordnen kann, deren Dimensionen denen der irreduziblen Darstellungen der SU(3) entsprechen.

Mathematisch gesehen ist die SU(3) eine achtparametrische einfach zusammenhängende Lie-Gruppe und bezeichnet die Menge der speziellen unitären 3×3 -Matrizen. Diese haben folgende Eigenschaften :

$$U^\dagger U = \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \det(U) = 1 \quad (1.25)$$

Üblicherweise werden die Elemente der SU(3) in einer Exponential-Darstellung angegeben :

$$U(\theta) = \exp \left(-i \sum_{a=1}^8 \theta_a \frac{\lambda_a}{2} \right) \quad (1.26)$$

Durch $\theta \equiv (\theta_a)_{a=1,\dots,8}$ wird jedes SU(3) Element eindeutig beschrieben. Mit λ_a werden die acht Gell-Mann-Matrizen bezeichnet, die folgende Eigenschaften haben :

$$\lambda_a = \lambda_a^\dagger, \quad \text{Tr}(\lambda_a \lambda_b) = 2\delta_{ab}, \quad \text{Tr}(\lambda_a) = 0 \quad (1.27)$$

Das Eichprinzip

In der Elementarteilchenphysik hat sich das Eichprinzip als ein ausgesprochen erfolgreiches Konzept erwiesen, mit dem sich die Wechselwirkungen zwischen Materiefeldern durch den Austausch masseloser Eichbosonen erklären lassen. Im Fall einer SU(N)-Eichtheorie, das heißt einer Theorie, deren Lagrange-Dichte invariant unter globalen SU(N)-Transformationen ist, handelt es sich bei den Feldern $\phi(x)$ in jedem Raum-Zeit-Punkt um Elemente eines Vektorraums V_x . Nun darf aber die Physik nicht von der lokalen Wahl einer Basis in V_x abhängen, so dass sich die Forderung ergibt, dass die Lagrange-Dichte auch invariant unter lokalen Eichtransformationen sein muss. Analog zur Allgemeinen Relativitätstheorie wird diese Forderung erfüllt durch die Einführung einer kovarianten Ableitung. Die kovariante Ableitung beruht nun auf dem Konzept des Parallel-Transports entlang einer Raum-Zeit-Kurve C_{yx} , mit deren Hilfe sich eine Abbildung des Vektorraums V_x auf V_y definieren lässt über : $U(C_{yx}) \in \text{SU}(N) : V_x \rightarrow V_y$, so dass der Vektor $\phi(x)$ durch $U(C_{yx})\phi(x) \in V_y$ zum Punkt y parallel transportiert wird. Um die kovariante Ableitung zu definieren, müssen Vektoren an infinitesimal benachbarten Punkten x und $x + dx$ subtrahiert werden. Diese lassen sich aber erst nach einem Parallel-Transport zum selben Raum-Zeit Punkt vergleichen, da die Basen in V_x und V_{x+dx} frei gewählt werden können. Der entsprechende Parallel-Transporter lässt sich damit schreiben als :

$$U(C_{x+dx,x}) = \mathbf{1} - A_\mu(x) dx_\mu \quad (1.28)$$

wobei $A_\mu(x)$ ein Element der Lie-Algebra ist : $A_\mu(x) \in \text{su}(N)$. Für die Parallel-Transporter müssen folgende Kompatibilitäts-Bedingungen erfüllt sein :

$$U(C_{xx}) = \mathbf{1}, \quad U(C_{zy} \circ C_{yx}) = U(C_{zy}) U(C_{yx}), \quad U(C_{xy}) = U(C_{yx})^{-1} \quad (1.29)$$

Das Verhalten unter lokalen Eichtransformationen $\phi(x) \rightarrow \phi'(x) = \Lambda^{-1}(x)\phi(x)$ und $\phi(y) \rightarrow \phi'(y) = \Lambda^{-1}(y)\phi(y)$ ist :

$$U(\mathcal{C}_{yx}) \rightarrow U'(\mathcal{C}_{yx}) = \Lambda^{-1}(y)U(\mathcal{C}_{yx})\Lambda(x) \quad (1.30)$$

Damit lässt sich nun das kovariante Differential von $\phi(x)$ definieren als :

$$D\phi(x) = U^{-1}(\mathcal{C}_{x+dx,x})\phi(x+dx) - \phi(x) \quad (1.31)$$

so dass schließlich für die kovariante Ableitung folgt :

$$D_\mu = \partial_\mu + A_\mu(x) \quad (1.32)$$

Im Fall der QCD treten acht Eichfelder $A_\mu^a(x)$ auf, die als Gluonen bezeichnet werden und für die gilt:

$$A_\mu(x) = -igA_\mu^a(x)\frac{\lambda_a}{2} \quad (1.33)$$

so dass für den fermionischen Anteil der Lagrange-Dichte folgt :

$$\mathcal{L}_{QCD}^f = \sum_f \bar{q}_f (\gamma_\mu D_\mu + m) q_f \quad (1.34)$$

mit $D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu^a(x)\frac{\lambda_a}{2}$. Bei m handelt es sich um die Matrix der Quark-Massen mit :

$$m = \text{diag}(m_u, m_d, m_s, m_c, m_t, m_b) \quad (1.35)$$

Die Summation erfolgt hier über die sechs Quark-Flavours f , wobei die Grassmann-wertigen Quark-Felder q_f und \bar{q}_f aus einem „Farb-Triplet“ bestehen mit den Indizes „r“, „g“ und „b“ für die Farben rot, grün und blau.

$$q_f = \begin{pmatrix} q_{f,r} \\ q_{f,g} \\ q_{f,b} \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

Der zugehörige Feldstärketensor lautet :

$$F_{\mu\nu}(x) = -igF_{\mu\nu}^a(x)\frac{\lambda_a}{2} \quad (1.37)$$

$$F_{\mu\nu}^a(x) = \partial_\mu A_\nu^a(x) - \partial_\nu A_\mu^a(x) + gf_{abc}A_\mu^b(x)A_\nu^c(x) \quad (1.38)$$

wobei die Strukturkonstanten der SU(3) durch die zugrunde liegende Lie-Algebra bestimmt sind :

$$\left[\frac{\lambda_a}{2}, \frac{\lambda_b}{2} \right] = if_{abc}\frac{\lambda_c}{2} \quad (1.39)$$

Die Dynamik des Eichfeldes selbst lässt sich nun durch eine Yang-Mills Wechselwirkung beschreiben :

$$\mathcal{L}_{QCD}^g = \frac{1}{4}(F_{\mu\nu}^a)^2 \quad (1.40)$$

Damit folgt aus dem Eichprinzip die (Euklidische) Lagrange-Dichte der QCD :

$$\mathcal{L}_{QCD} = \sum_f \bar{q}_f (\gamma_\mu D_\mu + m) q_f + \frac{1}{4} (F_{\mu\nu}^a)^2 \quad (1.41)$$

Im Euklidischen gelten für die Dirac-Matrizen die Antikommatorrelationen $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}$ was mit der hier getroffenen Wahl $\gamma_4 = -\gamma_0^M$ und $\gamma_i = i\gamma_i^M$ erfüllt wird.

Asymptotische Freiheit

Eine wesentliche Eigenschaft der QCD ist die sogenannte asymptotische Freiheit, die darauf zurückzuführen ist, dass die Stärke der Wechselwirkung von der Energieskala Q^2 des betrachteten Prozesses abhängt :

$$g_{QCD}^2(Q^2) = \frac{1}{\beta_0 \log\left(\frac{Q^2}{\Lambda^2}\right)} + \dots \quad (1.42)$$

mit $\Lambda \approx 1$ GeV und $\beta_0 = \frac{33-2N_f}{48\pi^2} \geq 0$ für N_f verschiedene Quark-Flavours. Die Stärke der Kopplung wird also um so kleiner, je größer die betrachtete Energieskala ist. Aus diesem Grund wird eine störungstheoretische Behandlung der QCD bei großen Energien $Q^2 \gg \Lambda^2$ möglich. Bei niedrigen Energien aber ist die Wechselwirkung so stark, dass ein nicht-perturbativer Ansatz verwendet werden muss, um beispielsweise das sogenannte Quark-Confinement zu erklären. Genau in diesem Bereich hat sich die Gitter-QCD als ein gutes Mittel erwiesen um nicht-störungstheoretische Rechnungen durchzuführen.

1.3 Gitter-QCD

Bei der Gitter-QCD handelt es sich um eine Formulierung der QCD auf einem diskreten Raum-Zeit-Gitter, die zwei wesentliche Ziele verfolgt. Einerseits führt die endliche Gitterkonstante a zu einer nicht-perturbativen Regularisierung durch die Einführung eines Impuls-Cutoffs bei $\frac{\pi}{a}$. Andererseits wird durch die Diskretisierung der Raum-Zeit eine effiziente Simulation der QCD möglich, wobei ganz ähnliche Methoden benutzt werden, wie bei der Simulation von Systemen der Statistischen Mechanik.

1.3.1 Die Wirkung der Gitter-QCD

Grundlage aller Gitter-Eichtheorien ist zunächst die Einschränkung des vier-dimensionalen Raum-Zeit-Kontinuums auf ein hyperkubisches Gitter. Neben der Bedingung der Eichinvarianz muss die Lagrange-Dichte im Limes verschwindender Gitterkonstanten $a \rightarrow 0$ und eines unendlich großen Volumens $V \rightarrow \infty$ den Kontinuums-Fall reproduzieren. Der Einfachheit halber wird für das Gitter eine einheitliche Gitterkonstante a gewählt, so dass nun die Materiefelder $q_f(x)$ und $\bar{q}_f(x)$ nur auf den Punkten dieses Gitters definiert sind.

Der Eichanteil der Wirkung

Während die Eichfelder im Kontinuum durch infinitesimale Parallel-Transporter gegeben sind, ist auf dem Gitter die kürzeste von Null verschiedene Distanz von der Größe der Gitterkonstanten a . Damit lässt sich das Eichfeld der QCD, das die benachbarten Punkte x und $x + a\hat{\mu}$ verbindet, ausdrücken durch die elementaren Parallel-Transporter beziehungsweise Link-Variablen $U(y, x) \in \text{SU}(N)$:

$$U(x + a\hat{\mu}, x) \equiv \exp \left(i g a \frac{\lambda^b}{2} A_\mu^b(x) \right) \quad \text{mit} \quad U(y, x) = U^{-1}(x, y) \quad (1.43)$$

Die einfachste Möglichkeit, ein eichinvariantes Objekt aus den Link-Variablen zu konstruieren, ist ein geschlossener Pfad der Seitenlänge a , ausgehend vom Punkt x in der Ebene, die durch $\hat{\mu}$ und $\hat{\nu}$ aufgespannt wird :

$$U_{\mu\nu}(x) \equiv U(x, x + a\hat{\nu}) U(x + a\hat{\nu}, x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu}) U(x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu}, x + a\hat{\mu}) U(x + a\hat{\mu}, x) \quad (1.44)$$

Hieraus lässt sich nun eine Wirkung für eine reine Gitter-Eichtheorie konstruieren, die in [1] beschrieben ist und deshalb auch als *Wilson-Plaquette-Wirkung* bezeichnet wird :

$$S_g[U] = \beta \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \left(1 - \frac{1}{N} \text{Re} \text{ Tr } U_{\mu\nu}(x) \right) \quad \text{für } \text{SU}(N) \quad (1.45)$$

Der Eich-Kopplungs-Parameter ist gegeben durch $\beta = \frac{2N}{g^2}$.

Die Fermion-Wirkung

Versucht man die Fermion-Wirkung in d Dimensionen auf einfache Weise zu diskretisieren, so würden sich an Stelle von einem nun 2^d Fermionen ergeben. Die Ursache hierfür ist der Gitter-Cut-Off, wodurch der Fermion-Propagator nicht nur einen Pol im Ursprung besitzt, sondern auch in allen Ecken der Brillouin-Zone. Eine Möglichkeit, diese Doppler zu entfernen, besteht darin, einen zusätzlichen Massenterm der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{a})$ einzuführen, der im Kontinuum verschwindet. Die Wirkung für Wilson-Fermionen hat damit die Form :

$$S_f[U, \bar{q}_f, q_f] = \sum_{x,y} \bar{q}_f(y) \mathbf{Q}(y, x; [U]) q_f(x) \quad (1.46)$$

mit der Fermion-Matrix \mathbf{Q} , sowie dem Hopping-Parameter κ mit $\frac{1}{2\kappa} = am_0 + 4r$, wobei der Einfachheit halber gleiche Quark-Massen vorausgesetzt werden :

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(y, x; [U]) &\equiv \delta(y, x) - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \{ \delta(x + a\hat{\mu}, x) U(x + a\hat{\mu}, x) (r + \gamma_\mu) \} \\ &\quad - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \{ \delta(x - a\hat{\mu}, x) U(x - a\hat{\mu}, x) (r - \gamma_\mu) \} \end{aligned} \quad (1.47)$$

Die Terme, die für die Unterdrückung der Doppler verantwortlich sind, enthalten den Wilson-Parameter $0 < r \leq 1$, der üblicherweise zu $r = 1$ gewählt wird.

Das Funktionalintegral

Nach dem Übergang zu einem diskreten Raum-Zeit Gitter hat das Funktionalintegral für den Erwartungswert des Operators O die Form :

$$\langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}q O e^{-(S_f + S_g)}}{\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}q e^{-(S_f + S_g)}} \quad (1.48)$$

mit

$$\mathcal{D}\bar{q}\mathcal{D}q = \prod_x \prod_{a=1}^4 d\bar{q}_a(x) dq_a(x), \quad \mathcal{D}U = \prod_b dU(b), \quad \mathcal{D}[\bar{q}, q, U] \equiv \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}q \quad (1.49)$$

wobei im Eichanteil das Produkt über alle Link-Variablen $b \in \{(x + a\hat{\mu}, x)\}$ zu bilden ist. Im Gegensatz zum Kontinuumsfall ist das Funktionalintegral nun endlich und kann numerisch ausgewertet werden, wobei der Aufwand in der Regel jedoch enorm ist. Der größte Teil der Rechenzeit wird hierbei für die Berechnung der sogenannten Fermion-Determinante benötigt, für die mit Hilfe der Grassmann-Integrationsregeln folgt :

$$\int \mathcal{D}\bar{q}\mathcal{D}q e^{-\int d^4x \bar{q}(x)\mathbf{Q}q(x)} = \det \mathbf{Q} \quad (1.50)$$

1.3.2 Partiell gequenchte QCD

Bei der Berechnung der Fermion-Determinanten auf dem Gitter zeigt sich, dass es numerisch enorm schwierig ist, mit kleinen Werten für die Quark-Massen zu arbeiten. Um die Simulationen überhaupt durchführen zu können, müssen unrealistisch große Werte für die Masse von up- und down-Quark verwendet werden. Eine mögliche Approximation ist es, die Fermion-Determinante durch eine Konstante zu ersetzen und in den Propagatoren die physikalischen Werte der Quark-Massen zu verwenden. Dies entspricht aber einer völligen Vernachlässigung der Effekte der Vakuumpolarisation, die durch die Quark-Schleifenterme beschrieben wird.

Da die systematischen Fehler dieser „gequenchten“ Approximation groß und nur schwer abzuschätzen sind, wird seit einiger Zeit ein anderer Ansatz verfolgt. Im Rahmen der partiell gequenchten Approximation arbeitet man mit den physikalischen Werten der Quark-Massen in den Propagatoren, die vergleichsweise wenig Aufwand bedeuten. In der Fermion-Determinante werden jedoch erheblich größere Werte für die Massen verwendet, um die Rechenzeit zu begrenzen. Die Quarks, die in den Propagatoren auftauchen, werden als Valenz-Quarks bezeichnet und die dynamischen Quarks in der Fermion-Determinante als See-Quarks.

Eine analytische Beschreibung der partiell gequenchten QCD wurde von Morel [2] eingeführt und basiert auf der Idee, für jedes Valenz-Quark ein zusätzliches kommutierendes Spin-1/2 Geister-Feld hinzuzufügen. Dies führt dazu, dass sich die Determinanten der Valenz- und Geister-Quarks gegenseitig herauskürzen, so dass diese keine Loop-Korrekturen liefern. Insgesamt gibt es nun drei Typen von Quarks, wobei hier der Einfachheit halber mit degenerierten Massen und $N_S = N_V = 2$ gearbeitet wird :

1. Zwei Valenz-Quarks q_i^V mit Masse m^V
2. Zwei See-Quarks q_i^S mit Masse m^S
3. Zwei Geister-Quarks \tilde{q}_i^V mit Masse m^V

Das Pfadintegral wird damit zu ($a = 0$) :

$$\begin{aligned}
 Z &= \int \mathcal{D} [\bar{q}_i^V, q_i^V, \bar{q}_i^S, q_i^S, \bar{\tilde{q}}_i^V, \tilde{q}_i^V, U] \\
 &\quad \times e^{-S_g - \int d^4x \sum_i [\bar{q}_i^V (\gamma_\mu D_\mu + m^V) q_i^V + \bar{q}_i^S (\gamma_\mu D_\mu + m^S) q_i^S + \bar{\tilde{q}}_i^V (\gamma_\mu D_\mu + m^V) \tilde{q}_i^V]} \\
 &= \int \mathcal{D}[U] e^{-S_g} \prod_i \frac{\det(\gamma_\mu D_\mu + m^V)}{\det(\gamma_\mu D_\mu + m^S)} \det(\gamma_\mu D_\mu + m^S) \\
 &= \int \mathcal{D}[U] e^{-S_g} \prod_i \det(\gamma_\mu D_\mu + m^S)
 \end{aligned} \tag{1.51}$$

1.4 Chirale Störungstheorie

Aufgrund der Größe der Kopplungs-Konstanten der QCD bei niedrigen Energien und der nicht-abelschen Natur der zugrunde liegenden SU(3)-Symmetrie ist es äußerst schwierig, experimentell überprüfbare Aussagen über Prozesse der Starken Wechselwirkung bei niedrigen Energien zu gewinnen. Eine mögliche Lösung für dieses Problem besteht in der direkten numerischen Berechnung der gesuchten Größen mit Hilfe der Methoden der Gitter-QCD. Während hiermit zwar sehr präzise Daten gewonnen werden können, wie zum Beispiel Untersuchungen des Hadronen-Spektrums zeigen, so gibt es jedoch auch klare Grenzen dieses Ansatzes. Diese Grenzen liegen in der Natur solcher Simulationen begründet, die vielfach wie eine Black-Box funktionieren. Sie liefern zwar präzise Vorhersagen, können aber nur sehr wenig zum Verständnis der Dynamik der betrachteten Prozesse beitragen.

Im Fall der QCD handelt es sich bei den fundamentalen Variablen um Quarks und Gluonen. Bei niedrigen Energien sind dies jedoch nicht die relevanten Freiheitsgrade der Starken Wechselwirkung, sondern es werden ausschließlich gebundene Zustände von Quarks, wie beispielsweise Protonen und Neutronen, beobachtet.

Eine besonders effiziente Beschreibung dieser Situation wird durch die *Chirale Störungstheorie* ermöglicht, bei der es sich um eine Effektive Feldtheorie für die QCD bei niedrigen Energien handelt.

1.4.1 Effektive Feldtheorien

Eine typische Situation, die häufig in der Physik auftritt, ist die Existenz mehrerer oft weit voneinander entfernter Energieskalen. Ein Beispiel hierfür sind die sechs in der Natur beobachteten Quark-Flavours, die sich grob in zwei Gruppen aufteilen lassen. Zum einen gibt es die leichten up-, down- und strange-Quarks und zum anderen die schweren charme-, bottom- und top-Quarks. Man erkennt deutlich, dass man in erster Näherung die leichtesten Quarks als masselos ansehen kann. Dieser *chirale Grenzfall* wird im folgenden den Ausgangspunkt für die Chirale Störungstheorie bilden.

Die Zielsetzung bei der Formulierung einer Effektiven Feldtheorie (EFT) ist es, eine möglichst einfache Beschreibung der betrachteten Prozesse in einem bestimmten Energiebereich zu liefern. Ermöglicht wird die Isolation der eigentlich interessanten Phänomene durch die Konzentration auf die wichtigsten physikalischen Prozesse. Hierbei werden allerdings nur die relevanten Freiheitsgrade berücksichtigt.

Es gibt einige allgemeine Beobachtungen, die einer Beschreibung der Natur mit Hilfe Effektiver Feldtheorien zugrunde liegen. Zunächst zeigt es sich, dass die Dynamik auf weit voneinander entfernten Energie- oder Längenskalen weitgehend unabhängig voneinander ist. Dadurch wird es auch möglich, auftretende nichtlokale Wechselwirkungen durch eine Summe lokaler Wechselwirkungen zu ersetzen, die aber in der Regel nicht mehr renormierbar sind. Um nun trotz einer typischerweise unendlich großen Zahl von Wechselwirkungstermen zu quantitativen Vorhersagen zu kommen, ist es nötig, die einzelnen Beiträge nach ihrer Größe zu sortieren. In einem solchen *Power-Counting-Schema* werden die in der Lagrange-Dichte auftretenden Beiträge beispielsweise nach Potenzen $\frac{E_{low}}{E_{high}}$ geordnet, falls es sich um eine Effektive Feldtheorie für niedrige Energien E_{low} handelt. In diesem Beispiel lassen sich nun quantitative Aussagen mit beliebiger Präzision δ gewinnen, in dem man in der Lagrange-Dichte der Effektiven Theorie alle Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}\left(\left(\frac{E_{low}}{E_{high}}\right)^d\right)$ bei vorgegebener Genauigkeit δ mit $\delta \approx \left(\frac{E_{low}}{E_{high}}\right)^d$ berücksichtigt. Die Beschreibung eines Prozesses durch eine Effektive Feldtheorie ermöglicht es damit, die Einfachheit phänomenologischer Modelle mit der Präzision und Erklärungskraft fundamentaler Theorien zu verbinden.

Bei der eigentlichen Konstruktion einer Effektiven Feldtheorie gibt es nun zwei verschiedene Ansätze. Dies ist zum einen der „Bottom Up“-Ansatz, der auf Steven Weinberg [5] zurückgeht und nur auf Symmetrieeprinzipien basiert. Zum anderen gibt es den auch als „Top-Down“-Verfahren bezeichneten Ansatz, der auf Ideen von Wilson zurückgeht. Im folgenden nun eine kurze Übersicht der wesentlichen Konzepte beider Konstruktionsprinzipien am Beispiel einer EFT für niedrige Energien :

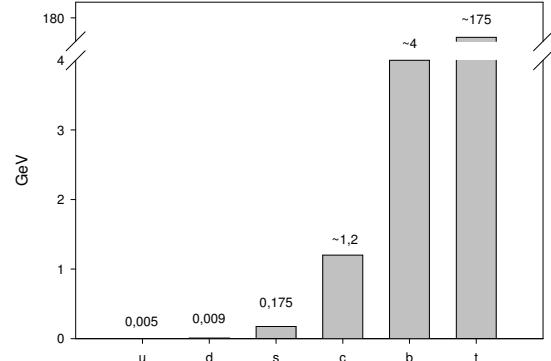


Abbildung 1.1: Quarkmassen

Bottom Up (Weinberg)

- Konstruktion aufgrund von Symmetrieprinzipien, wobei die fundamentale Theorie nicht bekannt zu sein braucht
- Vermutung von Steven Weinberg (1979) :
„if one writes down the most general possible Lagrangian, including all terms consistent with assumed symmetry principles, and then calculates S-matrix elements with this Lagrangian to any order of perturbation theory, the result will simply be the most general S-matrix consistent with analyticity, perturbative unitarity, cluster decomposition and the assumed symmetry principles“ [5]
- Konstruktionsprinzip einer EFT für Impulse $p < \Lambda$:
 1. Identifikation der relevanten Freiheitsgrade und Symmetrien des Problems.
 2. Konstruktion der allgemeinsten Lagrange-Dichte mit den geforderten Symmetrien.
 3. Sortierung der Terme in der Lagrange-Dichte nach ihrer Impulsdimension (Power-Counting)
 4. Bestimmung der Niederenergie-Koeffizienten (Matching)
- Anwendung der Standardmethoden der Quantenfeldtheorie auf die Lagrange-Dichte \mathcal{L}

Top Down (Wilson)

- Ausgangspunkt fundamentale Theorie : Identifikation des interessanten Energiebereiches und der relevanten Freiheitsgrade
- Ausintegration schwerer Freiheitsgrade (Teilchen) der fundamentalen Theorie (mit Masse M) und Operatorproduktentwicklung der nichtlokalen Wechselwirkung
- Matching : bei $\mu = M$ müssen die S-Matrix Elemente der leichten Teilchen in beiden Theorien übereinstimmen
- Power-Counting und Anwendung der Standardmethoden der Quantenfeldtheorie auf \mathcal{L}

Nach Ausintegration der schweren Felder im Funktionalintegral :

$$Z = \int \mathcal{D}\phi_L \int \mathcal{D}\phi_H e^{i \int d^D x \mathcal{L}(\phi_L, \phi_H)} = \int \mathcal{D}\phi_L e^{i \int d^D x \mathcal{L}_{eff}(\phi_L)} \quad (1.52)$$

lässt sich Effektive Lagrange-Dichte definieren durch :

$$\int d^D x \mathcal{L}_{eff}(\phi_L) = -i \ln \int \mathcal{D}\phi_H e^{i \int d^D x \mathcal{L}(\phi_L, \phi_H)} \quad (1.53)$$

Eine Reihendarstellung der nichtlokalen Wechselwirkung durch lokale Operatoren $O_i(\phi_L)$ wird gegeben durch :

$$\int d^D x \mathcal{L}_{eff}(\phi_L) \equiv \int d^D x \sum_i c_i O_i(\phi_L) \quad (1.54)$$

1.4.2 Chirale Störungstheorie im Kontinuum

Die Chirale Störungstheorie im Kontinuum wurde ursprünglich von Gasser, Leutwyler und Weinberg (siehe auch [6]) vorgestellt und stellt eine systematische Entwicklung der Effektiven Lagrange-Dichte nach Massen und Impulsen dar. Die hierbei auftretenden Niederenergiekonstanten werden auch als Gasser-Leutwyler-Koeffizienten bezeichnet und bestimmen im wesentlichen die Niederenergiedynamik der QCD. Im folgenden wird nun, basierend auf dem Bottom-Up Verfahren von Weinberg, die Effektive Lagrange-Dichte der Chiralen Störungstheorie konstruiert.

Chirale Symmetrie in der QCD

In einem ersten Schritt ist es notwendig, die relevanten Symmetrien der zugrunde liegenden QCD zu betrachten, deren (Euklidische) Lagrange-Dichte gegeben ist durch :

$$\mathcal{L} = \bar{q} (\gamma_\mu D_\mu + m) q + \frac{1}{4} (F_a^{\mu\nu})^2 \quad (1.55)$$

mit der Massenmatrix, die für $N_f = 6$ die Form $m = \text{diag}(m_u, m_d, m_s, m_c, m_t, m_b)$ hat. Die Summation über die betrachteten N_f Quark-Flavours wird an dieser Stelle nicht mehr explizit notiert, sondern die Fermion-Felder \bar{q} und q als N_f -Tupel im Flavour-Raum betrachtet. Zusammen mit den vier Lorentz- und den drei Farb-Indizes ergeben sich damit für $N_f = 6$ also $6 \times 3 \times 4 = 72$ Komponenten, über die geeignet zu summieren ist.

Nun lassen sich mit Hilfe der Projektionsoperatoren $P_R = \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)$ und $P_L = \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)$ die Fermion-Felder in ihre links- und rechtshändigen Anteile zerlegen :

$$q_R = P_R q \quad \text{und} \quad \bar{q}_R = \bar{q} P_L \quad (1.56)$$

$$q_L = P_L q \quad \text{und} \quad \bar{q}_L = \bar{q} P_R \quad (1.57)$$

wodurch sich die Lagrange-Dichte der QCD schreiben lässt als :

$$\mathcal{L} = \bar{q}_R \gamma_\mu D_\mu q_R + \bar{q}_L \gamma_\mu D_\mu q_L + \bar{q}_R m q_L + \bar{q}_L m q_R + \frac{1}{4} (F_a^{\mu\nu})^2 \quad (1.58)$$

Für verschwindende Quark-Massen $m = \mathbf{0}$ kommt es zu einer vollständigen Entkopplung der links- und rechtshändigen Terme in \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}^0 = \bar{q}_R \gamma_\mu D_\mu q_R + \bar{q}_L \gamma_\mu D_\mu q_L + \frac{1}{4} (F_a^{\mu\nu})^2 \quad (1.59)$$

Diese Situation wird als chiraler Grenzfall bezeichnet, da die Lagrange-Dichte nun invariant unter globalen $SU(N_f)_L \otimes SU(N_f)_R$ Transformationen der links- und rechtshändigen Fermion-Felder im Flavour-Raum ist :

$$q_L \rightarrow \exp(-i\theta_L^a T_a) q_L, \quad q_R \rightarrow \exp(-i\theta_R^a T_a) q_R \quad (1.60)$$

mit $\theta_V = \frac{1}{2}(\theta_R + \theta_L)$ und $\theta_A = \frac{1}{2}(\theta_R - \theta_L)$ lassen sich diese Transformationen auch in Vektor- und Axial-Vektor Komponenten zerlegen :

$$q \rightarrow \exp(-i\theta_V^a T_a) q, \quad q \rightarrow \exp(-i\theta_A^a T_a \gamma_5) q \quad (1.61)$$

Eigentlich ist die Lagrange-Dichte \mathcal{L} nicht nur invariant unter $SU(N_f)_L \otimes SU(N_f)_R$ -Transformationen, sondern auch unter der größeren Gruppe

$$U(N_f)_L \otimes U(N_f)_R = SU(N_f)_L \otimes SU(N_f)_R \otimes U(1)_L \otimes U(1)_R \quad (1.62)$$

Der $U(1)$ -Anteil der Symmetriegruppe lässt sich nun in einen skalaren und einen pseudoskalaren Anteil $U(1)_P \otimes U(1)_S$ zerlegen, die aber hier nicht weiter berücksichtigt werden müssen; Die $U(1)_S$ -Symmetrie führt im Noether-Formalismus zu einer globalen Erhaltung der Baryonen-Zahl und der pseudoskalare Anteil $U(1)_P$ weist eine Anomalie auf, wie in [7, 8] beschrieben wurde. Darunter versteht man den Fall, dass zwar die Lagrange-Dichte die entsprechende Symmetrie aufweist, jedoch das Maß des Pfadintegrals in der Quantenfeldtheorie nicht invariant unter diesen Transformationen ist.

Da die Massen des up-, down- und strange-Quarks klein sind, würde man erwarten, dass in der Natur eine zumindest näherungsweise realisierte chirale Symmetrie

$$SU(3)_\chi = SU(3)_V \otimes SU(3)_A \quad (1.63)$$

beobachtet werden könnte. Weil dies aber nicht der Fall ist, sondern sich die beobachteten Hadronen nach Darstellungen der $SU(3)_V$ klassifizieren lassen, wird diese chirale Symmetrie offenbar spontan gebrochen, so dass nur der $SU(3)_V$ -Anteil übrig bleibt.

Goldstone-Theorem

Die spontane Brechung der kontinuierlichen chiralen Symmetrie :

$$G \equiv SU(3)_V \otimes SU(3)_A \rightarrow H \equiv SU(3)_V \quad (1.64)$$

bedeutet, dass zwar die Lagrange-Dichte invariant unter der vollen Symmetriegruppe G ist, das Vakuum aber nur unter Transformationen aus der Untergruppe H . Das Goldstone-Theorem sagt nun die Existenz 8 masseloser Goldstone-Bosonen ϕ^a , $a \in \{1, \dots, 8\}$ im Raum der Nebengruppe G/H voraus. Anschaulich gesehen parametrisieren diese Felder die Freiheitsgrade längs des Potentialminimums, wie in der nebenstehenden Abbildung zu erkennen ist.

Für eine Darstellung der Nebengruppe $u(\phi) \equiv (u_L(\phi), u_R(\phi)) \in G$ und eine chirale Transformation $g \equiv (g_L, g_R) \in G$ mit $h(\phi, g) \in H$ gilt :

$$u_L \rightarrow g_L u_L(\phi) h^\dagger(\phi, g) \quad (1.65)$$

$$u_R \rightarrow g_R u_R(\phi) h^\dagger(\phi, g) \quad (1.66)$$

Die Matrix der Goldstone-Bosonen-Felder ist invariant unter chiralen Transformationen und lässt sich definieren durch :

$$U(\phi) \equiv u_R(\phi) u_L(\phi) \quad (1.67)$$

$$U(\phi) \rightarrow g_R U(\phi) g_L^\dagger \quad (1.68)$$

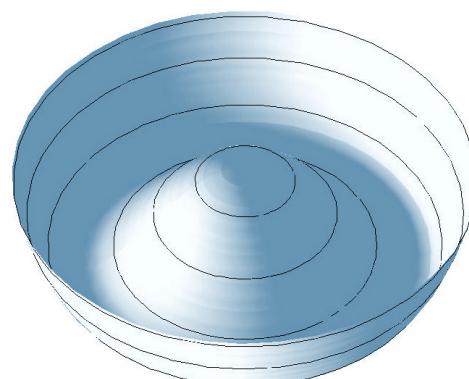


Abbildung 1.2: Potential

Relevante Freiheitsgrade

In der Natur werden nun aber keine acht masselosen Bosonen beobachtet, sondern nur ein Oktett pseudoskalarer Mesonen (bosonischer Hadronen), das im Vergleich zu den restlichen Hadronen besonders leicht ist. Man spricht in diesem Fall von Pseudo-Goldstone-Bosonen, da die chirale Symmetrie nicht exakt, sondern nur approximativ realisiert ist. Durch die explizite Symmetriebrechung aufgrund der kleinen aber von Null verschiedenen Quark-Massen erhalten die Pseudo-Goldstone-Bosonen eine endliche Masse.

Üblicherweise wird die $SU(N_f)$ Matrix der Pseudo-Goldstone-Bosonen auf folgende Weise parametrisiert :

$$U(\Phi) \equiv \exp\left(\frac{i}{F_0}\Phi\right) \quad \text{mit} \quad \Phi(x) \equiv 2\phi_a(x)T_a \quad (1.69)$$

wobei mit T_a die Generatoren der $SU(N_f)$ bezeichnet werden; Also die Gell-Mann-Matrizen mit $T_a = \frac{\lambda_a}{2}$ für $N_f = 3$ und die Pauli-Matrizen mit $T_a = \frac{\tau_a}{2}$ für $N_f = 2$. Betrachtet man nur die beiden leichtesten Quark-Flavours, also den Fall $N_f = 2$, ergeben sich nicht mehr acht, sondern es sind, entsprechend den drei Generatoren der $SU(2)$, nur noch drei Pseudo-Goldstone-Bosonen zu berücksichtigen. Hierbei handelt es sich um die drei Pionen : π^+ , π^- und π^0 . Dieser Spezialfall ist besonders wichtig, da sich die meisten wesentlichen Erkenntnisse im Rahmen der Chiralen Störungstheorie auch für den Fall von nur zwei Quark-Flavours gewinnen lassen. Der mathematische Aufwand ist hierbei erheblich kleiner und die Ergebnisse bleiben überschaubarer. Für $N_f = 2$ hat die Matrix U , jetzt auch als *Pion-Matrix* bezeichnet, die explizite Gestalt :

$$\Phi(x) = \begin{pmatrix} \pi^0(x) & \sqrt{2}\pi^+(x) \\ \sqrt{2}\pi^-(x) & -\pi^0(x) \end{pmatrix} \quad (1.70)$$

Allgemeinste chiral invariante Lagrange-Dichte

Die allgemeinste chiral (und Lorentz-) invariante Lagrange-Dichte lässt sich nun mit Hilfe der Pseudo-Goldstone-Bosonen-Matrix mit $U^\dagger U = 1$ angeben :

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_4 + \mathcal{L}_6 + \dots \quad (1.71)$$

Die Lagrange-Dichte ist eine unendliche Reihe von Termen zunehmender Impuls- und Massendimension. In führender Ordnung lautet der einfachste nicht-konstante Term :

$$\mathcal{L}_2 = \frac{F_0^2}{4} \text{Tr} \left(\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right) = \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) + \dots \quad (1.72)$$

Bei F_0 handelt es sich um eine Konstante, die sich über den Axial-Vektor-Strom mit der Pion-Zerfallskonstanten auf Tree-Level identifizieren lässt. Das Sortierungs- oder auch Power-Counting-Schema lautet hierbei :

$$U = \mathcal{O}(p^0), \quad \partial_\mu U = \mathcal{O}(p) \quad (1.73)$$

Die Ordnung $\mathcal{O}(p^D)$ wird im folgenden auch als chirale Dimension D bezeichnet, so dass der führende Term in \mathcal{L} die chirale Dimension $D = 2$ besitzt.

Loop-Beiträge und Power-Counting

Unterhalb der Skala von $\Lambda_{QCD} \approx 1 \text{ GeV}$ werden die Pseudo-Goldstone-Bosonen Felder $\Phi(x)$ als die einzigen hadronischen Freiheitsgrade angesehen. Betrachtet man nun einen beliebigen Prozess mit externen Impulsen und Energien von der Größenordnung $Q < \Lambda_{QCD}$, so korrespondiert das betrachtete Feynman-Diagramm zu einem Integral der Form :

$$\mathcal{A} = \int (d^4 p)^L \frac{1}{(p^2)^I} \prod_i (p^{d_i})^{V_i} \quad (1.74)$$

Hier bezeichnet L die Anzahl der Schleifen und I die Zahl der inneren Linien des Diagramms. Das Produkt läuft dabei über alle i verschiedenen Vertizes, die jeweils d_i Ableitungen enthalten und V_i mal im Diagramm vorkommen. Für die chirale Dimension $\mathcal{O}(p^D)$ folgt sofort :

$$D = \sum_i V_i d_i - 2I + 4L \quad (1.75)$$

Die Lagrange-Dichte wurde nun so konstruiert, dass in jeder Ordnung von D alle möglichen chiral-invarianten Terme berücksichtigt sind. Hierdurch ergibt sich trotz des Vorhandenseins nicht renormierbarer Wechselwirkungen immer ein endliches Ergebnis in allen Ordnungen, da für jede Divergenz stets ein passender Gegenterm in \mathcal{L} existiert. So werden beispielsweise Divergenzen, die aus Ein-Loop Beiträgen ($D = 4$) mit Vertizes aus \mathcal{L}_2 resultieren, absorbiert durch eine passende Renormierung der Koeffizienten von Vertizes aus \mathcal{L}_4 .

Explizite Symmetriebrechung

Neben der spontanen Brechung der chiralen Symmetrie gibt es durch die endlichen Quark-Massen $m \neq 0$ zusätzlich eine explizite Brechung der chiralen Symmetrie. Damit folgt für die Lagrange-Dichte :

$$\mathcal{L}_{QCD} = \mathcal{L}_{QCD}^0 + \bar{q} m q = \mathcal{L}_{QCD}^0 + \bar{q}_R m q_L + \bar{q}_L m q_R \quad (1.76)$$

mit der $N_f = 2$ Massenmatrix :

$$m = \begin{pmatrix} m_u & 0 \\ 0 & m_d \end{pmatrix} \quad (1.77)$$

Die chirale Lagrange-Dichte muss nun unter Berücksichtigung der endlichen Quark-Massen so konstruiert werden, dass alle mit den zugrunde liegenden Symmetrien verträglichen Terme berücksichtigt werden. Gleichzeitig muss aber sichergestellt sein, dass die explizite Symmetriebrechung auf die selbe Art erfolgt, wie in der QCD selbst. Das lässt sich erreichen, in dem man die Masse m vorübergehend durch ein sogenanntes Spurion M ersetzt, das sich unter chiralen Transformationen so transformiert, dass die Lagrange-Dichte invariant ist :

$$\mathcal{L}_{QCD} = \mathcal{L}_{QCD}^0 + \bar{q}_R M^\dagger q_L + \bar{q}_L M q_R \quad (1.78)$$

Die Lagrange-Dichte ist nun invariant unter $SU(3)$ -Transformationen $L, R \in SU(3)$. Mit Hilfe dieses Spurions M und der Matrix der Pion-Felder U wird jetzt wieder die allgemeinste chirale und Lorentz-invariante Effektive Lagrange-Dichte konstruiert. In führender Ordnung

$\mathcal{O}(p^2)$ ergibt sich :

$$\mathcal{L}_2^M = \frac{F_0^2}{4} \text{Tr} \left(\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right) - \frac{B_0 F_0^2}{2} \text{Tr} \left(M U^\dagger + U M^\dagger \right) \quad (1.79)$$

Neben F_0 taucht hier die positive Konstante B_0 mit der Dimension einer Masse auf. Ersetzt man nun das Spurion M durch die konstante Massenmatrix m , so wird die chirale Symmetrie auf genau die gleiche Weise gebrochen, wie in der QCD. Mit $\chi \equiv 2B_0m$ folgt dann :

$$\mathcal{L}_2 = \frac{F_0^2}{4} \text{Tr} \left(\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right) - \frac{F_0^2}{2} \text{Tr} \left(\chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right) \quad (1.80)$$

Das zugrunde liegende Power-Counting-Schema ist hier :

$$U = \mathcal{O}(p^0), \quad \partial_\mu U = \mathcal{O}(p), \quad \chi \sim m = \mathcal{O}(p^2) \quad (1.81)$$

An dieser Stelle ergibt sich eine deutliche Analogie zum Hamilton-Operator des Heisenberg-Ferromagneten :

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \sum_a \mu \vec{s}_a \cdot \vec{H}$$

wobei \mathbf{H}_0 invariant unter $O(3)$ -Rotationen ist und eine Symmetriebrechung durch das externe Feld \vec{H} erfolgt. Man erkennt, dass m hier dem externen Feld \vec{H} entspricht und das Quark-Kondensat $\langle 0 | \bar{q}q | 0 \rangle$ der spontanen Magnetisierung bei $\vec{H} = 0$.

1.4.3 Chirale Störungstheorie für die Gitter-QCD

Die Grundlage für die Berücksichtigung von Gitter-Artefakten im Rahmen der Chiralen Störungstheorie ist die Formulierung einer Effektiven Kontinuumstheorie für die Gitter-QCD durch Symanzik [9]. Hierdurch lassen sich bis zur betrachteten Ordnung in a sämtliche Gitter-Effekte explizit berechnen.

Symanzik Improvement und Gitter-Effekte

Durch den Impuls cut-off $p = \frac{\pi}{a}$ wird analog zu Λ_{QCD} eine neue Energieskala eingeführt, die den Gültigkeitsbereich der Effektiven Feldtheorie begrenzt. Der Entwicklungsparameter, der als hinreichend klein vorausgesetzt wird, ist hier die Gitterkonstante a . Die Wirkung der Effektiven Kontinuumstheorie hat nun folgende allgemeine Form :

$$S_{eff} = S_0 + a S_1 + a^2 S_2 + \dots \quad (1.82)$$

Der Kontinuumsterm führender Ordnung entspricht der QCD, also $S_0 \equiv S_{QCD}$. Für den Fall der Wilson-Fermionen bleibt nach einigen Umformungen als einziger relevanter Term in der Ordnung $\mathcal{O}(a)$ der Pauli-Term übrig mit :

$$a S_1 = a c_{SW} \bar{q} \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} q \quad (1.83)$$

der sich unter unter chiralen Transformationen genauso verhält wie der Massenterm, so dass sich die chirale Lagrange-Dichte nun direkt angeben lässt.

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_2 &= \frac{F_0^2}{4} \text{Tr} \left(\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right) + \frac{F_0^2}{4} B_0 \text{Tr} \left(m U^\dagger + U m \right) + \frac{F_0^2}{4} 2W'_0 c_{SW} a \text{Tr} \left(U^\dagger + U \right) \\ &\equiv \frac{F_0^2}{4} \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle + \frac{F_0^2}{4} B_0 \left\langle m U^\dagger + U m \right\rangle + \frac{F_0^2}{4} \left\langle \rho U^\dagger + \rho U \right\rangle\end{aligned}\quad (1.84)$$

Hier wurde $\rho \equiv 2W'_0 a c_{SW} \equiv 2W_0 a$ verwendet. Die Spur über die Flavour-Indizes wird im folgenden durch spitze Klammern gekennzeichnet, um eine kompaktere Notation zu ermöglichen. Zu beachten ist, dass der Sheikholeslami-Wohlert Parameter c_{SW} hierbei abhängig ist von der Eichkopplung β und dem Wilson-Parameter r . W_0 ist ein weiterer unbekannter Parameter der Massendimension $[m^3]$ beziehungsweise $\left[\frac{1}{fm^3}\right]$. Als Power-Counting-Schema wurde hier :

$$U = \mathcal{O}(p^0), \quad \partial_\mu U = \mathcal{O}(p), \quad \chi \sim m = \mathcal{O}(p^2), \quad \rho \sim a = \mathcal{O}(p^2) \quad (1.85)$$

verwendet.

$\mathcal{O}(p^4)$ Lagrange-Dichte

Die $\mathcal{O}(a^2)$ Lagrange-Dichte der Chiralen Störungstheorie bis $\mathcal{O}(p^4)$ lautet nun [10] :

$$\chi = 2B_0 m, \quad \rho = 2W_0 a \quad (1.86)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{F_0^2}{4} \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle \\ &\quad - L_1 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle^2 - L_2 \left\langle \partial_\mu U \partial_\nu U^\dagger \right\rangle^2 - L_3 \left\langle \left(\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right)^2 \right\rangle \\ &\quad + L_4 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle + W_4 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle \\ &\quad + L_5 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \left(\chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right) \right\rangle + W_5 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \left(\rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right) \right\rangle \\ &\quad - L_6 \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle^2 - W_6 \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle - W'_6 \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle^2 \\ &\quad - L_7 \left\langle \chi U^\dagger - U \chi^\dagger \right\rangle^2 - W_7 \left\langle \chi U^\dagger - U \chi^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger - U \rho^\dagger \right\rangle - W'_7 \left\langle \rho U^\dagger - U \rho^\dagger \right\rangle^2 \\ &\quad - L_8 \left\langle \chi U^\dagger \chi U^\dagger + U \chi^\dagger U \chi^\dagger \right\rangle - W_8 \left\langle \chi U^\dagger \rho U^\dagger + U \rho^\dagger U \chi^\dagger \right\rangle - W'_8 \left\langle \rho U^\dagger \rho U^\dagger + U \rho^\dagger U \rho^\dagger \right\rangle\end{aligned}\quad (1.87)$$

Hier wird der Fall $N_f = 2$ betrachtet, so dass die Parametrisierung der SU(2) Matrix U durch die Pion-Felder gegeben ist durch :

$$U(x) = \exp \left(\frac{i}{F_0} \pi_a(x) \tau_a \right) \quad (1.88)$$

mit den drei Pauli-Matrizen τ_a und den Pion-Feldern $\pi_a(x)$.

1.4.4 Axial gedrehter Massenterm

Als Resultat der expliziten Brechung der chiralen Symmetrie durch die nicht verschwindenden Quarkmassen besitzen die drei Pionen eine vergleichsweise kleine Masse von ungefähr 140 MeV. Bei numerischen Simulationen erweist es sich jedoch als problematisch, in den Bereich physikalischer Pion-Massen vorzustoßen, da die bisher verfügbaren Monte-Carlo-Algorithmen vom sogenannten *Slowing-Down* Phänomen betroffen sind, wodurch sich die benötigte Rechenzeit bei kleinen Massen drastisch erhöht. Als zusätzliche Schwierigkeit tritt das Problem auf, dass die Quark-Massen nun nicht mehr als Infrarot-Regulator wirken, so dass im Wilson-Dirac-Operator unphysikalisch kleine Eigenwerte auftreten, was die Simulationen erheblich erschwert und teilweise sogar unmöglich macht.

Mit Hilfe des Tricks, einen axial gedrehten Massenterm einzuführen [11], lassen sich die hier geschilderten Probleme jedoch zum Teil lösen. Zusätzlich zur gewöhnlichen Quarkmasse führt der gedrehte Massenterm nun zu einer von Null verschiedenen Twist-Masse, die als eine Art natürlicher Infrarot-Cutoff wirkt und das Auftreten extrem kleiner Eigenwerte des Wilson-Dirac-Operators verhindert. Das Problem des Slowing-Down bleibt dennoch bestehen, obwohl erwartet wird, dass es weniger ausgeprägt ist als im Fall ohne Twist [12]. Ein zusätzlicher Vorteil der Twisted-Mass-Rechnungen ist ein automatisches $\mathcal{O}(a)$ Improvement der Observablen im Fall eines Twist-Winkels von $\omega = \frac{\pi}{2}$.

Grundsätzlich gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten, Twisted-Mass-Rechnungen durchzuführen. Arbeitet man in der sogenannten *Physical-Basis*, so wird die gesamte chirale Drehung vom Massenterm auf den Gitterterm übertragen, wodurch die Massenmatrix ihre physikalisch korrekte Diagonalgestalt erhält. Dieses Vorgehen ist vorteilhaft für einige analytische Arbeiten im Rahmen der Chiralen Störungstheorie. Führt man jedoch Monte-Carlo-Simulationen der QCD durch, so werden die immer vorhandenen Gitterartefakte in der Chiralen Störungstheorie durch einen gewöhnlichen Gitterterm parametrisiert. Dieser Fall lässt sich in der *Twisted-Basis* beschreiben, in der der Gitterterm diagonal ist, während zusätzlich zur üblichen Wilson-Quark-Masse eine von Null verschiedene Twist-Masse eingeführt wird. Je nach Art der Fragestellung ist es günstiger, in der einen oder in der anderen Darstellung zu arbeiten, wobei die Resultate nach geeigneter Transformation jedoch völlig äquivalent sind. Es zeigt sich beispielsweise, dass sich die Phasenübergangsphänomene im Bereich kleiner Quark-Massen am einfachsten in der Twisted-Basis verstehen lassen.

Der Einfachheit halber wird im folgenden mit Quarks gleicher Masse $m = m_u = m_d$ gearbeitet, so dass die Massenmatrix proportional zur Einheitsmatrix wird. Führt man nun in der QCD eine axial gedrehte Massenmatrix $M'(\omega) = M e^{i\omega\gamma_5\tau_3}$ mit $M = m \mathbf{1}_{2x2}$ ein und transformiert die Quark-Felder gleichzeitig durch :

$$\psi' = e^{-i\omega\gamma_5\tau_3/2} \psi \quad (1.89)$$

so bleibt die Form der QCD Lagrange-Dichte unverändert. Im Rahmen der Chiralen Störungstheorie ist die Drehung des Massenterms gegeben durch :

$$\chi(\omega) = e^{-i\omega\tau_3/2} \chi e^{-i\omega\tau_3/2} \quad (1.90)$$

Bei gleichzeitiger Transformation der Pion-Matrix U zu

$$U' = e^{i\omega\tau_3/2} U e^{i\omega\tau_3/2} \quad (1.91)$$

wird die Drehung auf den Gitterterm übertragen, der nun die Form

$$\begin{aligned}\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \rangle &= \langle \rho e^{i\omega\tau_3/2} U'^\dagger e^{i\omega\tau_3/2} + e^{-i\omega\tau_3/2} U' e^{-i\omega\tau_3/2} \rho \rangle \\ &\equiv \langle \rho(\omega) U'^\dagger + U' \rho(\omega)^\dagger \rangle\end{aligned}\quad (1.92)$$

annimmt. Die Matrix $\rho(\omega)$ ist jetzt drehwinkelabhängig :

$$\rho(\omega) = e^{i\omega\tau_3} \rho = \rho_0 \mathbf{1}_2 + i\rho_3 \tau_3 \quad (1.93)$$

mit eindeutig bestimmten Koeffizienten $\rho_0 = 2W_0a \cos \omega$ und $\rho_3 = 2W_0a \sin \omega$. Die folgenden Rechnungen werden alle mit einem axial gedrehten Massenterm durchgeführt, so dass U' nun wieder durch U und χ' durch χ ersetzt werden kann.

1.4.5 Berechnung der Pion-Massen in führender Ordnung

Die Lagrange-Dichte (1.87) stellt eine Entwicklung für kleine Impulse p^2 , kleine Masse m und kleine Gitterkonstante a dar. „Klein“ bedeutet hier klein im Vergleich zu typischen hadronischen Energien von $\Lambda \approx 1\text{GeV}$. Im Folgenden werden wir uns auf den „physikalischen“ Grenzfall beschränken, in dem der Gitterterm einen wesentlich kleineren Beitrag zur Effektiven chiralen Lagrange-Dichte liefert als der Massenterm, d.h. :

$$1 \gg \frac{p^2}{\Lambda^2}, \frac{B_0 m}{\Lambda^2} \gg \frac{W_0 a}{\Lambda^2} \quad (1.94)$$

Im Kontinuumsfall, d.h. für $a=0$, verschwindet der Gitterterm und das Minimum der Lagrange-Dichte in führender Ordnung \mathcal{L}_2 wird angenommen für $U = 1$, da nur für räumlich konstantes U auch der kinetische Term verschwindet. Für ein kleines nicht verschwindendes a kann man den Gitterterm nun als Störung betrachten, die das Minimum der Lagrange-Dichte von $\pi'_i = 0$ zu einem neuen Wert $\tilde{\pi}_i$ verschiebt. Die physikalisch relevanten Felder sind dann gegeben durch die Differenz :

$$\pi_i = \pi'_i - \tilde{\pi}_i \quad (1.95)$$

Wie in [13] gezeigt, lässt sich das Minimum von \mathcal{L}_2 exakt bestimmen und aus der um das neue Vakuum entwickelten Lagrange-Dichte \mathcal{L}_2 kann man die Massen der Mesonen ermitteln zu :

$$M_\pi^2 = \sqrt{\chi_0^2 + 2\chi_0\rho_0 + \rho_0^2 + \rho_3^2} = 2B_0m + 2W_0a \cos \omega + \frac{W_0^2 a^2 \sin^2 \omega}{B_0 m} + \mathcal{O}(a^3) \quad (1.96)$$

Um das Minimum von \mathcal{L}_2 bis zur Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ zu berechnen, kann man aber auch $\pi'_i = \pi_i + \tilde{\pi}_i$ in die nach den Feldern entwickelte Lagrange-Dichte einsetzen. Aus der Bedingung, dass im Minimum der in den Feldern lineare Anteil von \mathcal{L} verschwinden muss, kann man dann das neue Vakuum $\vec{\tilde{\pi}}$ bestimmen. Hier werden nur kleine Abweichungen vom Kontinuumsfall betrachtet, so dass folgende Entwicklung sinnvoll erscheint :

$$\tilde{\pi}_i = a\tilde{\pi}_i^{(1)} + a^2\tilde{\pi}_i^{(2)} + \mathcal{O}(a^3) \quad (1.97)$$

Um also $\tilde{\pi}_i$ bis einschließlich zur Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ zu berechnen, ist es also ausreichend, im

in den Feldern linearen Term nur Beiträge bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^2)$ zu berücksichtigen. Mit $\mu(\omega) = \chi + \rho(\omega)$ folgt :

$$\mu_0 = \chi_0 + \rho_0 = 2B_0m + 2W_0a \cos(\omega) \quad (1.98)$$

$$\mu_3 = \rho_3 = 2W_0a \sin(\omega) \quad (1.99)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2 &= \text{const.} + \frac{1}{2} \left(K^{(1)} (\partial_\mu \pi_1)^2 + K^{(2)} (\partial_\mu \pi_2)^2 + K^{(3)} (\partial_\mu \pi_3)^2 \right) \\ &\quad + \left(\mu_0 \tilde{\pi}_1 + \frac{\mu_3 \tilde{\pi}_1 \tilde{\pi}_3}{3F_0} \right) \pi_1 + \left(\mu_0 \tilde{\pi}_2 + \frac{\mu_3 \tilde{\pi}_2 \tilde{\pi}_3}{3F_0} \right) \pi_2 \\ &\quad + \left(-F_0 \mu_3 + \mu_0 \tilde{\pi}_3 + \frac{\mu_3 (\tilde{\pi}_1^2 + \tilde{\pi}_2^2 + 3\tilde{\pi}_3^2)}{6F_0} \right) \pi_3 \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(B^{(1)} \pi_1^2 + B^{(2)} \pi_2^2 + B^{(3)} \pi_3^2 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3, \pi_i^3) \end{aligned} \quad (1.100)$$

Dies führt auf die Lösung :

$$\tilde{\pi}_1 = 0, \quad \tilde{\pi}_2 = 0, \quad \tilde{\pi}_3 = \frac{(-\mu_0 + \sqrt{\mu_0^2 + 2\mu_3^2}) F_0}{\mu_3} = F_0 \left(\frac{\rho_3}{\chi_0} - \frac{\rho_3 \rho_0}{\chi_0^2} \right) + \mathcal{O}(a^3) \quad (1.101)$$

Die $B^{(i)}$ und $K^{(i)}$ haben dabei folgende Werte :

$$B^{(1)} = \mu_0 + \frac{\mu_3 \tilde{\pi}_3}{3F_0} - \frac{\mu_0 \tilde{\pi}_3^2}{6F_0^2} + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3) = \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{6\chi_0} + \mathcal{O}(a^3) \quad (1.102)$$

$$B^{(2)} = \mu_0 + \frac{\mu_3 \tilde{\pi}_3}{3F_0} - \frac{\mu_0 \tilde{\pi}_3^2}{6F_0^2} + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3) = \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{6\chi_0} + \mathcal{O}(a^3) \quad (1.103)$$

$$B^{(3)} = \mu_0 + \frac{\mu_3 \tilde{\pi}_3}{F_0} - \frac{\mu_0 \tilde{\pi}_3^2}{2F_0^2} + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3) = \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \mathcal{O}(a^3) \quad (1.104)$$

sowie

$$K^{(1,2)} = 1 - \frac{\tilde{\pi}_3^2}{3F_0^2} + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3) = 1 - \frac{\rho_3^2}{3\chi_0^2} + \mathcal{O}(a^3) \quad \text{und} \quad K^{(3)} = 1 \quad (1.105)$$

Aus der Gleichung

$$\mathcal{L}_{LO} = \text{const.} + K_i \left(\frac{1}{2} (\partial_\mu \pi_i)^2 + \frac{1}{2} \frac{B^{(i)}}{K^{(i)}} \pi_i^2 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3, \pi_i^3) \quad (1.106)$$

kann man nun die Werte der Pion-Massen $M_{\pi_i}^2 = \frac{B^{(i)}}{K^{(i)}}$ ablesen. Nach Einsetzen von $\vec{\pi}$ und Entwickeln von $\mu(\omega)$ nach a erhält man :

$$\begin{aligned} M_\pi^2 &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \mathcal{O}(a^3) \\ &= 2B_0m + 2W_0a \cos \omega + \frac{W_0^2 a^2 \sin^2 \omega}{B_0 m} + \mathcal{O}(a^3) \end{aligned} \quad (1.107)$$

was mit dem Ergebnis der exakten Rechnung übereinstimmt.

1.5 Partiell gequenchte Chirale Störungstheorie

Die partiell gequenchte Chirale Störungstheorie lässt sich aus der zugrunde liegenden partiell gequenchten QCD genauso konstruieren, wie die bekannte ungequenchte Theorie [3]. Nun werden aber nicht wie bisher nur zwei Quark-Felder betrachtet, sondern zusätzlich zwei Valenz- und zwei Geisterfelder, die für den partiell gequenchten Charakter der Theorie verantwortlich sind.

1.5.1 Symmetriegruppe

Die Lagrange-Dichte und das Pfadintegral der partiell gequenchten QCD sind invariant gegenüber Transformationen aus der graduierter Gruppe :

$$G = \mathrm{SU}(4|2)_R \times \mathrm{SU}(4|2)_L \quad (1.108)$$

Aber ebenso, wie in der vollen Theorie, ist der Vakuumzustand nur invariant unter Transformationen aus der Untergruppe :

$$H = \mathrm{SU}(4|2)_V \quad (1.109)$$

was zum Auftreten von nun 35 masselosen Goldstone-Bosonen führt, die durch eine $\mathrm{SU}(4|2)$ -Matrix U beschrieben werden können :

$$U = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad (1.110)$$

Während die 4×4 -Matrix A und die 2×2 -Matrix D zusammen 19 kommutierende Einträge enthalten, die gewöhnliche Goldstone-Bosonen-Felder beschreiben, treten in B und C insgesamt 16 antikommutierende Grassmann-Elemente auf. Diese Felder repräsentieren fermionische Goldstone-Teilchen und bestehen aus einem gewöhnlichen Quark und einem Geister-Quark. Als eine Erweiterung der klassischen Spur einer Matrix wird im Zusammenhang mit partiell gequenchten Rechnungen immer mit der sogenannten Superspur gearbeitet, die über die Relation :

$$\mathrm{sTr}(U) \equiv \mathrm{Tr}A - \mathrm{Tr}D \quad (1.111)$$

definiert ist. Dadurch bleibt auch die Eigenschaft der Zyklizität erhalten :

$$\mathrm{sTr}(U_1 U_2) = \mathrm{sTr}(U_2 U_1) \quad (1.112)$$

Im Rahmen der partiell gequenchten Rechnungen wird nun die Superspur, ebenso wie bisher die Spur, mit $\langle \rangle$ abgekürzt. Eine Verwechslung ist allerdings ausgeschlossen, da niemals Spur und Superspur gleichzeitig auftreten werden.

1.5.2 Parametrisierung der Felder

Die $SU(4|2)$ -Matrix U lässt sich schreiben als :

$$U = \exp\left(\frac{i}{F_0}\Phi\right) \quad \text{mit} \quad s\text{Tr}\Phi = 0 \quad (1.113)$$

Für die Parametrisierung von Φ in der partiell gequenchten Störungstheorie gibt es im wesentlichen zwei Ansätze. Zum einen kann man in Analogie zu den Rechnungen im ungequenchten Fall eine Matrix-Darstellung der 35 Generatoren der $SU(4|2)$ verwenden. Diese Methode ist eine direkte Verallgemeinerung der bisherigen Rechnungen und erweist sich für Arbeiten auf Tree-Level als besonders effizient. Die Matrix Φ wird nun parametrisiert durch :

$$\Phi = 2 \sum_{a=1}^{35} \pi'_a T_a \quad (1.114)$$

wobei mit π'_a , ebenso wie bisher, die noch unverschobenen Felder bezeichnet werden. Im Zusammenhang mit Loop-Rechnungen erweist sich dieser Ansatz jedoch als ungünstig, da es keine einfache Zuordnung der Generatoren zu ihrem Quark-Inhalt gibt. Arbeitet man statt dessen direkt in der Quark-Basis, so bedeutet dies, dass nun jedem Element von Φ ein Generator zugeordnet wird. Um nun weiterhin die Bedingung $s\text{Tr}\Phi = 0$ zu gewährleisten, muss ein zusätzliches Feld $\Phi_0 = s\text{Tr}\Phi$ eingeführt werden, das Kopplungen zu den Goldstone-Bosonen besitzt und die Masse M_0 hat. Da aber die Masse M_0 von der Größenordnung Λ_{QCD} ist, wird das chirale Power-Counting gestört. Es stellt sich jedoch heraus, dass Φ_0 im Limes $M_0 \rightarrow \infty$ von den restlichen Feldern entkoppelt und am Ende der Rechnungen ausintegriert werden kann [33]. Φ hat damit die Form :

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_{1,1} & \phi_{1,2} & \phi_{1,3} & \phi_{1,4} & \theta_{1,5} & \theta_{1,6} \\ \phi_{2,1} & \phi_{2,2} & \phi_{2,3} & \phi_{2,4} & \theta_{2,5} & \theta_{2,6} \\ \phi_{3,1} & \phi_{3,2} & \phi_{3,3} & \phi_{3,4} & \theta_{3,5} & \theta_{3,6} \\ \phi_{4,1} & \phi_{4,2} & \phi_{4,3} & \phi_{4,4} & \theta_{4,5} & \theta_{4,6} \\ \theta_{5,1} & \theta_{5,2} & \theta_{5,3} & \theta_{5,4} & \phi_{5,5} & \phi_{5,6} \\ \theta_{6,1} & \theta_{6,2} & \theta_{6,3} & \theta_{6,4} & \phi_{6,5} & \phi_{6,6} \end{pmatrix} \quad (1.115)$$

wobei es sich bei ϕ_{ij} um bosonische und bei θ_{ij} um fermionische Goldstone-Bosonen-Felder handelt.

Hier wurde für die Herleitung der Ergebnisse auf Tree-Level der erste Ansatz verfolgt, der auch bereits für die Rechnungen bis $\mathcal{O}(a)$ in [34] verwendet wurde. Im Fall der Loop-Rechnungen ist es jedoch günstiger, in der Quark-Basis zu arbeiten, da sich auf diese Weise das Ergebnis durch eine einfache Substitution aus dem Kontinuums-Resultat ableiten lässt.

1.5.3 Lagrange-Dichte bis $\mathcal{O}(p^4)$

Für die Rechnungen auf Tree-Level wird die chirale Lagrange-Dichte bis $\mathcal{O}(a^2)$ benötigt, die formal die gleiche Gestalt hat, wie im ungequenchten Fall, nun allerdings unter der Verwendung von Superspuren. Im Gitter- und Massenterm sind nun zusätzlich zwei Valenz-

und zwei Geister-Quarks zu berücksichtigen. Damit folgt :

$$\chi = 2B_0 \text{diag}(m_V, m_V, m_S, m_S, m_V, m_V) \quad (1.116)$$

$$\rho = 2W_0 a \mathbf{1}_{6 \times 6} \quad (1.117)$$

Erfolgt nun eine Drehung des Massenterms, so bleibt der partiell gequenchte Charakter der Theorie nur erhalten, falls die Drehung für See- und Geister-Quarks mit dem gleichen Winkel erfolgt. Mit den erweiterten Pauli-Matrizen :

$$\tau_3^V = \begin{pmatrix} \tau_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3^S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3^G = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_3 \end{pmatrix} \quad (1.118)$$

folgt für die gedrehte Massenmatrix nun :

$$\chi(\omega_V, \omega_S) = e^{-i\omega_V \tau_3^V/2} e^{-i\omega_S \tau_3^S/2} e^{-i\omega_V \tau_3^G/2} \chi e^{-i\omega_V \tau_3^G/2} e^{-i\omega_S \tau_3^S/2} e^{-i\omega_V \tau_3^V/2} \quad (1.119)$$

Da die τ_3^X ($X \in \{V, S, G\}$) kommutieren, und damit die Reihenfolge keine Rolle spielt, ist folgende Abkürzung sinnvoll :

$$e^{-i\omega \tau_3/2} \equiv e^{-i\omega_V \tau_3^V/2} e^{-i\omega_S \tau_3^S/2} e^{-i\omega_V \tau_3^G/2} \quad (1.120)$$

so dass die Massenmatrix formal die bekannte Gestalt annimmt

$$\chi(\omega) = e^{-i\omega \tau_3/2} \chi e^{-i\omega \tau_3/2} \quad (1.121)$$

Im folgenden wird aber wieder in der sogenannten *Physical-Basis* gearbeitet. Zu dieser Darstellung gelangt man, indem man durch eine chirale Rücktransformation die Drehung vom Massen- auf den Gitterterm überträgt.

$$U' = e^{i\omega \tau_3/2} U e^{i\omega \tau_3/2} \quad (1.122)$$

Da im folgenden jedoch nur noch die gedrehte Matrix der Goldstone-Bosonen-Felder U' auftritt, wird diese direkt umbenannt zu U . Damit haben nun Gitter- und Massenterm die Form :

$$\chi = 2B_0 \text{diag}(m_V, m_V, m_S, m_S, m_V, m_V) \quad (1.123)$$

$$\rho(\omega) = e^{i\omega \tau_3} \rho = \begin{pmatrix} \rho^V(\omega_V) & 0 & 0 \\ 0 & \rho^S(\omega_S) & 0 \\ 0 & 0 & \rho^G(\omega_V) \end{pmatrix} \quad (1.124)$$

wobei die 2×2 -Matrizen ρ^X verwendet werden mit :

$$\rho^X = \mathbf{1}_{2 \times 2} 2W_0 a \cos \omega_X + i\tau_3 2W_0 a \sin \omega_X \quad (1.125)$$

und

$$\chi_0^X = 2B_0 m_X \quad (1.126)$$

$$\rho_0^X = 2W_0 a \cos \omega_X \quad (1.127)$$

$$\rho_3^X = 2W_0 a \sin \omega_X \quad (1.128)$$

Die Lagrange-Dichte im partiell gequenchten Fall hat damit die Form :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L} = & \frac{F_0^2}{4} \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle \\
 & - L_1 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle^2 - L_2 \left\langle \partial_\mu U \partial_\nu U^\dagger \right\rangle^2 - L_3 \left\langle \left(\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right)^2 \right\rangle \\
 & + L_4 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle + W_4 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle \\
 & + L_5 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \left(\chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right) \right\rangle + W_5 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \left(\rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right) \right\rangle \\
 & - L_6 \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle^2 - W_6 \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle - W'_6 \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle^2 \\
 & - L_7 \left\langle \chi U^\dagger - U \chi^\dagger \right\rangle^2 - W_7 \left\langle \chi U^\dagger - U \chi^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger - U \rho^\dagger \right\rangle - W'_7 \left\langle \rho U^\dagger - U \rho^\dagger \right\rangle^2 \\
 & - L_8 \left\langle \chi U^\dagger \chi U^\dagger + U \chi^\dagger U \chi^\dagger \right\rangle - W_8 \left\langle \chi U^\dagger \rho U^\dagger + U \rho^\dagger U \chi^\dagger \right\rangle - W'_8 \left\langle \rho U^\dagger \rho U^\dagger + U \rho^\dagger U \rho^\dagger \right\rangle
 \end{aligned} \tag{1.129}$$

Kapitel 2

Berechnung der Pion-Massen bis $\mathcal{O}(p^4)$

Um die Pion-Massen in Ordnung p^4 zu berechnen, muss man in einem ersten Schritt die Tree-Level Terme der Lagrange-Dichte $\mathcal{L}_\chi = \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_4$ betrachten und die Position des neuen Vakuums unter Berücksichtigung der Gitterartefakte finden. In einem zweiten Schritt sind dann die Ein-Schleifen-Beiträge aus \mathcal{L}_4 auszuwerten. Um die Schreibweise zu vereinfachen, werden außerdem die Abkürzungen :

$$\begin{aligned} L_{54} &= 2L_4 + L_5, & W_{54} &= 2W_4 + W_5 \\ L_{86} &= 2L_6 + L_8, & W_{86} &= 2W_6 + W_8, & W'_{86} &= 2W'_6 + W'_8 \end{aligned} \quad (2.1)$$

verwendet. Als Effektive Feldtheorie nutzt die Chirale Störungstheorie, wie schon erwähnt, die Existenz verschiedener Energieskalen aus, um konkrete Vorhersagen zu liefern. Zum einen ist dies die Energieskala typischer hadronischer Energien $\Lambda \approx 1$ GeV. Zum anderen die Skala χ der Mesonen-Impulse p^2 und Quark-Massen χ_0 . Bei Rechnungen auf dem Gitter tritt nun noch eine dritte Energieskala auf, die hier durch $\rho \equiv \sqrt{\rho_0^2 + \rho_3^2}$ repräsentiert wird. Im Folgenden wird nur der sogenannte physikalische Grenzfall betrachtet, in dem die Gittereffekte ρ als klein im Vergleich zu den Quark-Massen angesehen werden :

$$\Lambda^2 \gg \chi \gg \rho \quad (2.2)$$

Hierbei ist zu beachten, dass ebenso wie bisher, zur Vereinfachung der Rechnungen, mit Quarks gleicher Masse $m = m_u = m_d$ gearbeitet wird. Bei der Entwicklung der Ergebnisse in den beiden Parametern χ und ρ ist es ausgesprochen wichtig, diese Skalenrelationen zu beachten. Weiterhin macht es nur Sinn, Terme bis einschließlich $\mathcal{O}(\chi^2)$, $\mathcal{O}(\chi\rho)$ und $\mathcal{O}(\rho^2)$ zu betrachten, da die hier verwendete chirale Lagrange-Dichte \mathcal{L}_4 aus Gleichung (1.87) nur bis zu dieser Ordnung gültig ist.

2.1 Bestimmung des Minimums der Lagrange-Dichte durch Entwicklung von \mathcal{L}_χ nach den Pion-Feldern

Bei der Suche nach dem Minimum von \mathcal{L}_χ kann man völlig analog zur Rechnung in führender Ordnung ($\mathcal{O}(p^2)$) vorgehen. Zunächst sind die drei in den Feldern linearen Terme der Lagrange-Dichte zu identifizieren. Aus der Bedingung, dass diese im Minimum $\tilde{\pi}_i$ verschwinden müssen, kann man auch hier wieder drei Gleichungen für die $\tilde{\pi}_i$ ableiten :

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\chi_0 + \rho_0 + 16 \frac{L_{86}\chi_0^2}{F_0^2} + 16 \frac{L_8\chi_1^2}{F_0^2} + 16 \frac{W_{86}\chi_0\rho_0}{F_0^2} + 16 \frac{W'_{86}\rho_0^2}{F_0^2} \right) \tilde{\pi}_1 \\ &\quad + \left(\frac{\rho_3}{3F_0} + \frac{32}{3} \frac{W_{86}\rho_3\chi_0}{F_0^3} + \frac{64}{3} \frac{W'_{86}\rho_3\rho_0}{F_0^3} \right) \tilde{\pi}_1 \tilde{\pi}_3 + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3) \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\chi_0 + \rho_0 + 16 \frac{L_{86}\chi_0^2}{F_0^2} + 16 \frac{W_{86}\chi_0\rho_0}{F_0^2} + 16 \frac{W'_{86}\rho_0^2}{F_0^2} \right) \tilde{\pi}_2 \\ &\quad + \left(\frac{\rho_3}{3F_0} + \frac{32}{3} \frac{W_{86}\rho_3\chi_0}{F_0^3} + \frac{64}{3} \frac{W'_{86}\rho_3\rho_0}{F_0^3} \right) \tilde{\pi}_2 \tilde{\pi}_3 + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} 0 &= -\rho_3 F_0 - 8 \frac{W_{86}\rho_3\chi_0}{F_0} - 16 \frac{W'_{86}\rho_3\rho_0}{F_0} \\ &\quad + \left(\chi_0 + \rho_0 + 16 \frac{L_{86}\chi_0^2}{F_0^2} + 16 \frac{W_{86}\chi_0\rho_0}{F_0^2} + 16 \frac{W'_{86}\rho_0^2}{F_0^2} - 16 \frac{W'_{86}\rho_3^2}{F_0^2} \right) \tilde{\pi}_3 \\ &\quad + \left(\frac{\rho_3}{6F_0} + \frac{16}{3} \frac{W_{86}\chi_0\rho_3}{F_0^3} + \frac{32}{3} \frac{W'_{86}\rho_0\rho_3}{F_0^3} \right) \tilde{\pi}_1^2 + \left(\frac{\rho_3}{6F_0} + \frac{16}{3} \frac{W_{86}\chi_0\rho_3}{F_0^3} + \frac{32}{3} \frac{W'_{86}\rho_0\rho_3}{F_0^3} \right) \tilde{\pi}_2^2 \\ &\quad + \left(\frac{\rho_3}{2F_0} + 16 \frac{W_{86}\rho_3\chi_0}{F_0^3} + 32 \frac{W'_{86}\rho_3\rho_0}{F_0^3} \right) \tilde{\pi}_3^2 + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Dies führt unter Berücksichtigung von Beiträgen bis einschließlich zur Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ auf die Lösung :

$$\tilde{\pi}_1 = 0, \quad \tilde{\pi}_2 = 0$$

$$\begin{aligned} \pi_{3,\min} &= F_0 \left(\frac{\rho_3}{\chi_0} - \frac{\rho_3\rho_0}{\chi_0^2} \right) + \frac{(8W_{86} - 16L_{86})\rho_3}{F_0} + \frac{(-24W_{86} + 16W'_{86} + 32L_{86})\rho_3\rho_0}{\chi_0 F_0} \\ &= \frac{F_0 W_0 \sin(\omega)}{B_0 m} + \frac{(16W_{86} - 32L_{86})W_0 \sin(\omega)}{F_0} - \frac{F_0 W_0^2 \sin(\omega) \cos(\omega)}{B_0^2 m^2} a^2 \\ &\quad + \frac{(-48W_{86} + 32W'_{86} + 64L_{86})W_0^2 \sin(\omega) \cos(\omega)}{B_0 m F_0} a^2 + \mathcal{O}(a^3) \end{aligned} \quad (2.6)$$

2.2 Direkte Bestimmung des Minimums von \mathcal{L}_χ

Um zu überprüfen, ob in (2.6) tatsächlich das korrekte Minimum identifiziert wurde, kann man das Minimum der Lagrange-Dichte aber auch direkt bestimmen. Die fundamentale

Variable der Chiralen Störungstheorie ist die SU(2) Matrix $U(x) = \exp\left(\frac{i}{F_0}\pi'_a(x)\tau_a\right)$ die man auch wie folgt parametrisieren kann :

$$U = u_0 \mathbf{1} + iu_i \tau_i \quad \text{mit} \quad 1 = u_0^2 + u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 \quad (2.7)$$

und

$$u_0 = \cos\left(\frac{|\vec{\pi}'|}{F_0}\right), \quad u_i = \frac{\pi'_i}{|\vec{\pi}'|} \sin\left(\frac{|\vec{\pi}'|}{F_0}\right), \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad \text{und} \quad |\vec{\pi}'| = \sqrt{\pi_1^2 + \pi_2^2 + \pi_3^2}$$

Damit wird klar, dass sich die Lagrange-Dichte \mathcal{L}_χ auch als Funktion der u_j mit $j \in \{0, 1, 2, 3\}$ betrachten lässt : $\mathcal{L}_\chi(u_0, u_1, u_2, u_3)$. Genauso wie Abschnitt 1.3 wird auch hier das Minimum für den Fall konstanten U 's beziehungsweise konstanter Felder angenommen. Bezuglich dieser Variablen kann man nun wiederum das Minimum von \mathcal{L}_χ suchen, was natürlich mit dem oben gefundenen übereinstimmen muss. Aus weitergehenden Überlegungen [15] folgt, dass bei der von uns gewählten Drehung des Massenterms um die τ_3 Achse das Minimum nur in π_3 -Richtung verschoben wird, so dass tatsächlich nur noch u_0 und u_3 zu berücksichtigen sind :

$$U = u_0 \mathbf{1} + iu_3 \tau_3 \quad \text{mit} \quad 1 = u_0^2 + u_3^2 \quad (2.8)$$

Nun können wir die Lagrange-Dichte als Funktion von u_0 und u_3 angeben :

$$\mathcal{L}_\chi(u_0, u_3) = -c_1 u_0 + c_2 u_0^2 + c_3 u_3 + c_4 u_3^2 + c_5 u_0 u_3 \quad (2.9)$$

wobei die Konstanten c_i die Werte

$$c_1 = (\chi_0 + \rho_0) F_0^2 \quad (2.10)$$

$$c_2 = -4 L_8 \chi_0^2 - 16 L_6 \chi_0^2 - 16 W_6 \chi_0 \rho_0 + 4 W'_8 \rho_3^2 - 4 W'_8 \rho_0^2 - 16 W'_6 \rho_0^2 - 4 W_8 \chi_0 \rho_0 \quad (2.11)$$

$$c_3 = -\rho_3 F_0^2 \quad (2.12)$$

$$c_4 = 4 L_8 \chi_0^2 - 4 W'_8 \rho_3^2 + 4 W'_8 \rho_0^2 - 16 W'_6 \rho_3^2 + 4 W_8 \chi_0 \rho_0 \quad (2.13)$$

$$c_5 = -16 W_6 \chi_0 \rho_3 - 32 W'_6 \rho_0 \rho_3 - 8 W_8 \chi_0 \rho_3 - 16 W'_8 \rho_0 \rho_3 \quad (2.14)$$

besitzen. Um nun das Minimum von (2.9) zu bestimmen, haben wir zunächst eine Substitution durchgeführt :

$$u_0 = \sqrt{1 - z^2}, \quad u_3 = z \quad (2.15)$$

womit Gleichung (2.9) die Form

$$\mathcal{L}_\chi(z) = c_4 z^2 + \left(c_5 \sqrt{1 - z^2} + c_3\right) z + c_2 (1 - z^2) - c_1 \sqrt{1 - z^2} \quad (2.16)$$

nimmt. Im Minimum muss wiederum die Ableitung von $\mathcal{L}_\chi(z)$ bezüglich z verschwinden :

$$0 = -\frac{c_5 z^2}{\sqrt{1 - z^2}} + \left(2 c_4 + \frac{c_1}{\sqrt{1 - z^2}} - 2 c_2\right) z + c_5 \sqrt{1 - z^2} + c_3 \quad (2.17)$$

Diese Gleichung lässt sich mit dem Ansatz

$$z = z_0 + z_1 a + z_2 a^2 \quad (2.18)$$

iterativ lösen, was auf folgende Werte für die z_i führt :

$$z_0 = 0 \quad (2.19)$$

$$z_1 = \frac{W_0 \sin(\omega)}{B_0 m} + \frac{(-32 L_{86} + 16 W_{86}) W_0 \sin(\omega)}{F_0^2} + \frac{(1024 L_{86}^2 - 512 W_{86} L_{86}) B_0 m W_0 \sin(\omega)}{F_0^4} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} z_2 = & -\frac{W_0^2 \cos(\omega) \sin(\omega)}{B_0^2 m^2} + \frac{(64 L_{86} - 48 W_{86} + 32 W'_{86}) W_0^2 \sin(\omega) \cos(\omega)}{B_0 m F_0^2} \\ & + \frac{(-3072 L_{86}^2 + 3072 W_{86} L_{86} - 1024 W'_{86} L_{86} - 512 W_{86}^2) W_0^2 \sin(\omega) \cos(\omega)}{F_0^4} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Einsetzen der expliziten Formen von ρ_0, ρ_3 und χ_0 sowie Vernachlässigung aller Terme, in denen die Niederenergie-Koeffizienten L_i, W_i und W'_i in höherer als erster Ordnung auftreten, liefert für z und damit u_3 den Wert :

$$\begin{aligned} u_{3,min} = & \frac{W_0 a \sin(\omega)}{B_0 m} + \frac{(16 W_{86} - 32 L_{86}) W_0 a \sin(\omega)}{F_0^2} \\ & + \frac{(-512 L_{86} W_{86} + 1024 L_{86}^2) B_0 m W_0 \sin(\omega)}{F_0^4} a \\ & - \frac{W_0^2 \sin(\omega) \cos(\omega)}{B_0^2 m^2} a^2 + \frac{(-48 W_{86} + 32 W'_{86} + 64 L_{86}) W_0^2 \sin(\omega) \cos(\omega)}{B_0 m F_0^2} a^2 \\ & + \frac{(-512 W_{86}^2 + 3072 L_{86} W_{86} - 1024 L_{86} W'_{86} - 3072 L_{86}^2) W_0^2 \sin(\omega) \cos(\omega)}{F_0^4} a^2 \\ & + \mathcal{O}(a^3) \end{aligned} \quad (2.22)$$

Setzt man die in Gleichung (2.6) gefundene Position des Minimums in die Parametrisierung von U aus Gleichung (2.7) ein, so stellt man fest, dass $u_{3,min}$ mit $\sin\left(\frac{\tilde{\pi}_3}{F_0}\right) = \frac{\tilde{\pi}_3}{F_0} + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_3^3)$ übereinstimmen muss, was hier tatsächlich erfüllt ist. Damit ist also sichergestellt, dass bei Entwicklung der Lagrange-Dichte nach den Pion-Feldern wirklich die korrekte Position des Minimums identifiziert wurde.

2.3 Tree-Level Pion-Massen

Die physikalisch relevanten Felder sind, wie oben bereits beschrieben, gegeben durch die Differenz :

$$\pi_i = \pi'_i - \tilde{\pi}_i$$

Setzt man nun $\pi'_i = \pi_i + \tilde{\pi}_i$ in die Lagrange-Dichte ein, so hat diese im wesentlichen die Form :

$$\mathcal{L}_4 = \text{const.} + K_i \left(\frac{1}{2} (\partial_\mu \pi_i)^2 + \frac{1}{2} \frac{B^{(i)}}{K^{(i)}} \pi_i^2 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\pi}_i^3, \pi_i^3, \partial_\mu \pi_i^3) \quad (2.23)$$

Mit dem Minimum $\tilde{\pi}$ aus (2.6) erhält man für die Koeffizienten der in den Feldern π_i quadratischen Terme $B^{(i)}$ die Werte :

$$\begin{aligned} B^{(1)} &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{6\chi_0} + \frac{16L_{86}\chi_0^2 + 16W_{86}\chi_0\rho_0 + 16W'_{86}\rho_0^2}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{\frac{32}{3}W_{86} - \frac{32}{3}L_{86} - \frac{16L_8\chi_1^2}{3\chi_0^2}}{F_0^2} \rho_3^2 + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2\rho, \chi\rho^2, \rho^3) \\ &= 2B_0m + 64 \frac{L_{86}B_0^2m^2}{F_0^2} + \left(2W_0 \cos(\omega) + 64 \frac{B_0mW_{86}W_0 \cos(\omega)}{F_0^2} \right) a \\ &\quad + \frac{W_0^2 \sin^2(\omega)}{3B_0m} a^2 + \frac{64 W'_{86}W_0^2 \cos^2(\omega)}{F_0^2} a^2 \\ &\quad + \frac{(-\frac{128}{3}L_{86} + \frac{128}{3}W_{86}) W_0^2 \sin^2(\omega)}{F_0^2} a^2 + \mathcal{O}(m^3, m^2a, a^2m, a^3) \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} B^{(2)} &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{6\chi_0} + \frac{16L_{86}\chi_0^2 + 16W_{86}\chi_0\rho_0 + 16W'_{86}\rho_0^2}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{\frac{32}{3}W_{86} - \frac{32}{3}L_{86} - \frac{16L_8\chi_1^2}{3\chi_0^2}}{F_0^2} \rho_3^2 + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2\rho, \chi\rho^2, \rho^3) \\ &= 2B_0m + 64 \frac{L_{86}B_0^2m^2}{F_0^2} + \left(2W_0 \cos(\omega) + 64 \frac{B_0mW_{86}W_0 \cos(\omega)}{F_0^2} \right) a \\ &\quad + \frac{W_0^2 \sin^2(\omega)}{3B_0m} a^2 + \frac{64 W'_{86}W_0^2 \cos^2(\omega)}{F_0^2} a^2 \\ &\quad + \frac{(-\frac{128}{3}L_{86} + \frac{128}{3}W_{86}) W_0^2 \sin^2(\omega)}{F_0^2} a^2 + \mathcal{O}(m^3, m^2a, a^2m, a^3) \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned}
B^{(3)} &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{16 L_{86} \chi_0^2 + 16 W_{86} \chi_0 \rho_0 + 16 W'_{86} \rho_0^2 + (-16 W'_{86} + 32 W_{86} - 32 L_{86}) \rho_3^2}{F_0^2} \\
&\quad + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2 \rho, \chi \rho^2, \rho^3) \\
&= 2 B_0 m + 64 \frac{L_{86} B_0^2 m^2}{F_0^2} + \left(2 W_0 \cos(\omega) + 64 \frac{B_0 m W_{86} W_0 \cos(\omega)}{F_0^2} \right) a \\
&\quad + \frac{W_0^2 \sin^2(\omega)}{B_0 m} a^2 + \frac{64 W'_{86} W_0^2 \cos^2(\omega) + (-128 L_{86} - 64 W'_{86} + 128 W_{86}) W_0^2 \sin^2(\omega)}{F_0^2} a^2 \\
&\quad + \mathcal{O}(m^3, m^2 a, a^2 m, a^3)
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Die Koeffizienten der kinetischen Terme $K^{(i)}$ sind gegeben durch :

$$\begin{aligned}
K^{(1,2)} &= 1 - \frac{\rho_3^2}{3\chi_0^2} + \frac{8 \chi_0 L_{54} + 8 W_{54} \rho_0 + (8 W_{54} - \frac{16}{3} W_{86} - \frac{20}{3} L_{54} + \frac{32}{3} L_{86}) \frac{\rho_3^2}{\chi_0}}{F_0^2} \\
&\quad + \frac{1}{\chi} \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2 \rho, \chi \rho^2, \rho^3) \\
&= 1 + 16 \frac{B_0 m L_{54}}{F_0^2} + 16 \frac{W_{54} W_0 \cos(\omega)}{F_0^2} a \\
&\quad - \frac{W_0^2 \sin^2(\omega)}{3 B_0^2 m^2} a^2 + \frac{(-\frac{40}{3} L_{54} + \frac{64}{3} L_{86} + 16 W_{54} - \frac{32}{3} W_{86}) W_0^2 \sin^2(\omega)}{B_0 m F_0^2} a^2 \\
&\quad + \frac{1}{m} \mathcal{O}(m^3, m^2 a, a^2 m, a^3)
\end{aligned} \tag{2.27}$$

$$\begin{aligned}
K^{(3)} &= 1 + \frac{8 L_{54} \chi_0 + 8 W_{54} \rho_0 + (8 W_{54} - 4 L_{54}) \frac{\rho_3^2}{\chi_0}}{F_0^2} + \frac{1}{\chi} \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2 \rho, \chi \rho^2, \rho^3) \\
&= 1 + 16 \frac{B_0 m L_{54}}{F_0^2} + 16 \frac{W_{54} W_0 \cos(\omega)}{F_0^2} a + \frac{(16 W_{54} - 8 L_{54}) W_0^2 \sin^2(\omega)}{B_0 m F_0^2} a^2 \\
&\quad + \frac{1}{m} \mathcal{O}(m^3, m^2 a, a^2 m, a^3)
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Damit ergibt sich für Quadrate der Massen $M_{\pi_i}^2 = \frac{B^{(i)}}{K^{(i)}}$:

$$\begin{aligned}
M_{(1)}^2 &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{(-8 L_{54} + 16 L_{86}) \chi_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8 W_{54} - 8 L_{54} + 16 W_{86}) \chi_0 \rho_0}{F_0^2} \\
&\quad + \frac{(-8 W_{54} + 16 W'_{86}) \rho_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8 W_{54} - 16 L_{86} + 16 W_{86}) \rho_3^2}{F_0^2} \\
&\quad + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2 \rho, \chi \rho^2, \rho^3)
\end{aligned} \tag{2.29}$$

$$\begin{aligned}
M_{(1)}^2 = & 2B_0m + \frac{(64L_{86} - 32L_{54})B_0^2m^2}{F_0^2} + 2W_0 \cos(\omega) a \\
& + \frac{(-32W_{54} + 64W_{86} - 32L_{54})B_0mW_0 \cos(\omega)}{F_0^2} a + \frac{W_0^2 \sin^2(\omega)}{B_0m} a^2 \\
& + \frac{(-32W_{54} + 64W'_{86})W_0^2 \cos^2(\omega) + (64W_{86} - 32W_{54} - 64L_{86})W_0^2 \sin^2(\omega)}{F_0^2} a^2 \\
& + \mathcal{O}(m^3, m^2a, a^2m, a^3)
\end{aligned} \tag{2.30}$$

$$\begin{aligned}
M_{(2)}^2 = & \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{(-8L_{54} + 16L_{86})\chi_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54} - 8L_{54} + 16W_{86})\chi_0\rho_0}{F_0^2} \\
& + \frac{(-8W_{54} + 16W'_{86})\rho_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54} - 16L_{86} + 16W_{86})\rho_3^2}{F_0^2} \\
& + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2\rho, \chi\rho^2, \rho^3)
\end{aligned} \tag{2.31}$$

$$\begin{aligned}
M_{(2)}^2 = & 2B_0m + \frac{(64L_{86} - 32L_{54})B_0^2m^2}{F_0^2} + 2W_0 \cos(\omega) a \\
& + \frac{(-32W_{54} + 64W_{86} - 32L_{54})B_0mW_0 \cos(\omega)}{F_0^2} a + \frac{W_0^2 \sin^2(\omega)}{B_0m} a^2 \\
& + \frac{(-32W_{54} + 64W'_{86})W_0^2 \cos^2(\omega) + (64W_{86} - 32W_{54} - 64L_{86})W_0^2 \sin^2(\omega)}{F_0^2} a^2 \\
& + \mathcal{O}(m^3, m^2a, a^2m, a^3)
\end{aligned} \tag{2.32}$$

$$\begin{aligned}
M_{(3)}^2 = & \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{(-8L_{54} + 16L_{86})\chi_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54} - 8L_{54} + 16W_{86})\chi_0\rho_0}{F_0^2} \\
& + \frac{(-8W_{54} + 16W'_{86})\rho_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54} - 16W'_{86} - 32L_{86} + 32W_{86})\rho_3^2}{F_0^2} \\
& + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2\rho, \chi\rho^2, \rho^3)
\end{aligned} \tag{2.33}$$

$$\begin{aligned}
M_{(3)}^2 = & 2B_0m + \frac{(64L_{86} - 32L_{54})B_0^2m^2}{F_0^2} + 2W_0 \cos(\omega) a \\
& + \frac{(-32W_{54} + 64W_{86} - 32L_{54})B_0mW_0 \cos(\omega)}{F_0^2} a + \frac{W_0^2 \sin^2(\omega)}{B_0m} a^2 \\
& + \frac{(128W_{86} - 32W_{54} - 64W'_{86} - 128L_{86})W_0^2 \sin^2(\omega)}{F_0^2} a^2 \\
& + \frac{(-32W_{54} + 64W'_{86})W_0^2 \cos^2(\omega)}{F_0^2} a^2 + \mathcal{O}(m^3, m^2a, a^2m, a^3)
\end{aligned} \tag{2.34}$$

In Übereinstimmung mit früheren Arbeiten [13],[15] ist auch die Beobachtung, dass die π_1, π_3 beziehungsweise π_2, π_3 Massen-Aufspaltung proportional zu a^2 ist.

$$\begin{aligned} M_{\pi_3}^2 - M_{\pi_1}^2 &= \frac{(-16 L_{86} - 16 W'_{86} + 16 W_{86}) \rho_3^2}{F_0^2} + \mathcal{O}(\rho^3) \\ &= \frac{(-64 L_{86} - 64 W'_{86} + 64 W_{86}) W_0^2 \sin^2(\omega)}{F_0^2} a^2 + \mathcal{O}(a^3) \end{aligned} \quad (2.35)$$

2.4 Schleifenbeiträge zu den Pion-Massen

2.4.1 Übliche Parametrisierung der Felder

Zunächst wurde versucht, die Schleifenbeiträge zu den Pion-Massen in der üblichen Parametrisierung der Felder durchzuführen :

$$U = e^{\frac{i}{F_0}(\pi_a \tau_a + \tilde{\pi}_3 \tau_3)} \quad (2.36)$$

Dabei zeigt es sich jedoch, dass der damit verbundene Rechenaufwand ausgesprochen groß ist und gleichzeitig einige schwer zu beantwortende konzeptuelle Fragen auftauchen. Aus diesem Grund folgt hier nun ein kurzer Einblick in die mit Rechnungen in der üblichen Parametrisierung verbundenen Probleme. Es ist aus Zeitgründen unpraktikabel, diesen Ansatz weiter zu verfolgen, da sich durch eine Reparametrisierung drastische Vereinfachungen ergeben.

Identifikation der Wechselwirkungsterme in der Lagrange-Dichte

Um die Schleifenbeiträge zu den Pion-Massen zu berechnen, ist es zunächst notwendig, die relevanten Wechselwirkungsterme in der Lagrange-Dichte \mathcal{L}_2 zu identifizieren.

$$\mathcal{L}_2 = \frac{F_0^2}{4} \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle$$

Hierzu muss man \mathcal{L}_2 zunächst nach Potenzen der Pion-Felder entwickeln und es ergibt sich :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2 &= \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\pi}' \partial_\mu \vec{\pi}') + \frac{1}{6F_0^2} [(\vec{\pi}' \partial_\mu \vec{\pi}') (\vec{\pi}' \partial_\mu \vec{\pi}') - \vec{\pi}'^2 (\partial_\mu \vec{\pi}' \partial_\mu \vec{\pi}')] \\ &\quad - \frac{\vec{\pi}'^2}{45F_0^4} [(\vec{\pi}' \partial_\mu \vec{\pi}') (\vec{\pi}' \partial_\mu \vec{\pi}') - \vec{\pi}'^2 (\partial_\mu \vec{\pi}' \partial_\mu \vec{\pi}')] \\ &\quad - F_0^2 (\chi_0 + \rho_0) - F_0 \rho_3 \pi'_3 + \frac{(\chi_0 + \rho_0)}{2} \vec{\pi}'^2 + \frac{\rho_3 \vec{\pi}'^2 \pi'_3}{6F_0} - \frac{(\chi_0 + \rho_0)}{24F_0^2} (\vec{\pi}'^2)^2 \\ &\quad - \frac{\rho_3 \vec{\pi}'^4 \pi'_3}{120F_0^3} + \frac{(\chi_0 + \rho_0)}{720F_0^2} (\vec{\pi}'^2)^3 + \mathcal{O}(\vec{\pi}'^7) \end{aligned} \quad (2.37)$$

An dieser Stelle ist es ausreichend, Terme bis einschließlich zur Ordnung $\mathcal{O}(\pi'^6)$ zu berücksichtigen. Denn ausgedrückt als Funktion der physikalischen Felder $\vec{\pi} = \vec{\pi}' - \vec{\tilde{\pi}}$ mit

$$\tilde{\pi}_1 = 0, \quad \tilde{\pi}_2 = 0, \quad \tilde{\pi}_3 = F_0 \left(\frac{\rho_3}{\chi_0} - \frac{\rho_3 \rho_0}{\chi_0^2} \right) + \mathcal{O}(a^3)$$

liefern Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\pi'^7)$ entweder Beiträge, die mehr als vier Pion-Felder enthalten oder solche, die von der Ordnung $\mathcal{O}(a^3)$ sind, hier also nicht berücksichtigt werden. Unter Vernachlässigung konstanter Terme nimmt die Lagrange-Dichte nun folgende Form an :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\rho_3^2}{3\chi_0^2} \right) [(\partial_\mu \pi_1 \partial_\mu \pi_1) + (\partial_\mu \pi_2 \partial_\mu \pi_2)] + \frac{1}{2} (\partial_\mu \pi_3 \partial_\mu \pi_3) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{6\chi_0} \right) (\pi_1^2 + \pi_2^2) + \frac{1}{2} \left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi} \right) \pi_3^2 \\ &\quad + \mathcal{L}_2^{WW,3} + \mathcal{L}_2^{WW,4} + \mathcal{O}(\rho^3, \rho^2 \chi, \pi_i^5)\end{aligned}\quad (2.38)$$

Die Terme der Lagrange-Dichte, die Produkte von drei Pion-Feldern enthalten, sind zu der Abkürzung $\mathcal{L}_2^{WW,3}$ zusammengefasst und tragen zum Dreiervertex bei :

$$\mathcal{L}_2^{WW,3} = \left(\frac{\rho_3}{3\chi_0 F_0} - \frac{\rho_0 \rho_3}{3\chi_0^2 F_0} \right) [\vec{\pi} (\partial_\mu \vec{\pi}) (\partial_\mu \pi_3) - \pi_3 (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi})] \quad (2.39)$$

Die Wechselwirkungsterme der Lagrange-Dichte, die zum Vierervertex beitragen sind :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_2^{WW,4} &= -\frac{1}{24F_0^2} \left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{10\chi_0} \right) (\vec{\pi}^2)^2 - \frac{\rho_3^2}{60\chi_0 F_0^2} \pi_3^2 (\vec{\pi}^2) \\ &\quad + \left(\frac{1}{6F_0^2} - \frac{\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} \right) (\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi})^2 - \frac{4\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} (\pi_3 \partial_\mu \pi_3) (\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \\ &\quad - \left(\frac{1}{6F_0^2} - \frac{2\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} \right) (\vec{\pi}^2) (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) + \frac{4\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} (\pi_3^2) (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \\ &\quad - \frac{\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} (\vec{\pi}^2) (\partial_\mu \pi_3 \partial_\mu \pi_3)\end{aligned}\quad (2.40)$$

Symmetrisierung der Vertizes

Für die Berechnung der Pion-Selbstenergien ist es nun notwendig, die Vertizes geeignet zu symmetrisieren. Im Fall des Vierervertex aus Gl. (2.40) folgt :

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,1} = -\frac{1}{24F_0^2} \left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{10\chi_0} \right) (\vec{\pi}^2)^2 \equiv c_{V_{4,1}} (\vec{\pi}^2)^2 \quad (2.41)$$

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,2} = + \left(\frac{1}{6F_0^2} - \frac{\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} \right) (\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi})^2 \equiv c_{V_{4,2}} (\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi})^2 \quad (2.42)$$

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,3} = - \left(\frac{1}{6F_0^2} - \frac{2\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} \right) (\vec{\pi}^2) (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \equiv c_{V_{4,3}} (\vec{\pi}^2) (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \quad (2.43)$$

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,4} = -\frac{\rho_3^2}{60\chi_0 F_0^2} \pi_3^2 \vec{\pi}^2 \equiv c_{V_{4,4}} \pi_3^2 (\vec{\pi}^2) \quad (2.44)$$

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,5} = -\frac{4\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} (\pi_3 \partial_\mu \pi_3) (\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \equiv c_{V_{4,5}} (\pi_3 \partial_\mu \pi_3) (\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \quad (2.45)$$

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,6} = +\frac{4\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} (\pi_3^2) (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \equiv c_{V_{4,6}} (\pi_3^2) (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) \quad (2.46)$$

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,7} = -\frac{\rho_3^2}{45\chi_0^2 F_0^2} (\vec{\pi}^2) (\partial_\mu \pi_3 \partial_\mu \pi_3) \equiv c_{V_{4,7}} (\vec{\pi}^2) (\partial_\mu \pi_3 \partial_\mu \pi_3) \quad (2.47)$$

Am Beispiel des ersten Terms lässt sich die Symmetrisierung am einfachsten verdeutlichen :

$$\mathcal{L}_2^{WW,4,1} = c_{V_{4,1}} (\vec{\pi}^2)^2 = -\frac{1}{4!} V_{4,1}^{a,b,c,d} \pi_a \pi_b \pi_c \pi_d \quad (2.48)$$

Für $V_{4,1}^{a,b,c,d}$ folgt damit :

$$V_{4,1}^{a,b,c,d} = -8 c_{V_{4,1}} (\delta_{a,b} \delta_{c,d} + \delta_{a,c} \delta_{b,d} + \delta_{a,d} \delta_{b,c}) \quad (2.49)$$

Die Ableitungen $\partial_\mu \pi_a$ in den anderen Termen führen jeweils zu einem Faktor (*ip*), wobei alle Impulse als einlaufend definiert werden.

$$\begin{aligned} V_{4,2}^{a,b,c,d} &= 2 c_{V_{4,2}} (\delta_{a,b} \delta_{c,d} (p_a p_c + p_a p_d + p_b p_c + p_b p_d) + \delta_{a,c} \delta_{b,d} (p_a p_b + p_a p_d + p_b p_c + p_c p_d)) \\ &\quad + 2 c_{V_{4,2}} (\delta_{a,d} \delta_{b,c} (p_a p_b + p_a p_c + p_b p_d + p_c p_d)) \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$V_{4,3}^{a,b,c,d} = 4 c_{V_{4,3}} (\delta_{a,b} \delta_{c,d} (p_a p_b + p_c p_d) + \delta_{a,c} \delta_{b,d} (p_a p_c + p_b p_d) + \delta_{a,d} \delta_{b,c} (p_a p_d + p_b p_c)) \quad (2.51)$$

$$V_{4,4}^{a,b,c,d} = -4 c_{V_{4,4}} (\delta_{a,b} \delta_{c,3} \delta_{d,3} + \delta_{a,c} \delta_{b,3} \delta_{d,3} + \delta_{a,d} \delta_{b,3} \delta_{c,3} + \delta_{b,c} \delta_{a,3} \delta_{d,3} + \delta_{b,d} \delta_{a,3} \delta_{c,3} + \delta_{c,d} \delta_{a,3} \delta_{b,3}) \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned} V_{4,5}^{a,b,c,d} &= c_{V_{4,5}} (\delta_{a,b} \delta_{c,3} \delta_{d,3} (p_a p_c + p_a p_d + p_b p_c + p_b p_d) + \delta_{a,c} \delta_{b,3} \delta_{d,3} (p_a p_b + p_a p_d + p_b p_c + p_c p_d)) \\ &\quad + c_{V_{4,5}} (\delta_{a,d} \delta_{b,3} \delta_{c,3} (p_a p_b + p_a p_c + p_b p_d + p_c p_d) + \delta_{b,c} \delta_{a,3} \delta_{d,3} (p_a p_b + p_a p_c + p_b p_d + p_c p_d)) \\ &\quad + c_{V_{4,5}} (\delta_{b,d} \delta_{a,3} \delta_{c,3} (p_a p_b + p_a p_d + p_b p_c + p_c p_d) + \delta_{c,d} \delta_{a,3} \delta_{b,3} (p_a p_c + p_a p_d + p_b p_c + p_b p_d)) \end{aligned} \quad (2.53)$$

$$\begin{aligned} V_{4,6}^{a,b,c,d} &= 4 c_{V_{4,6}} (\delta_{a,b} \delta_{c,3} \delta_{d,3} p_a p_b + \delta_{a,c} \delta_{b,3} \delta_{d,3} p_a p_c + \delta_{a,d} \delta_{b,3} \delta_{c,3} p_a p_d + \delta_{b,c} \delta_{a,3} \delta_{d,3} p_b p_c) \\ &\quad + 4 c_{V_{4,6}} (\delta_{b,d} \delta_{a,3} \delta_{c,3} p_b p_d + \delta_{c,d} \delta_{a,3} \delta_{b,3} p_c p_d) \end{aligned} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} V_{4,7}^{a,b,c,d} &= 4 c_{V_{4,7}} (\delta_{a,b} \delta_{c,3} \delta_{d,3} p_c p_d + \delta_{a,c} \delta_{b,3} \delta_{d,3} p_b p_d + \delta_{a,d} \delta_{b,3} \delta_{c,3} p_b p_c + \delta_{b,c} \delta_{a,3} \delta_{d,3} p_a p_d) \\ &\quad + 4 c_{V_{4,7}} (\delta_{b,d} \delta_{a,3} \delta_{c,3} p_a p_c + \delta_{c,d} \delta_{a,3} \delta_{b,3} p_a p_b) \end{aligned} \quad (2.55)$$

$$V_4^{a,b,c,d} = \sum_{\alpha=1}^7 V_{4,\alpha}^{a,b,c,d} \quad (2.56)$$

Für den Dreiervertex aus Gl. (2.39) :

$$\mathcal{L}_2^{WW,3} = c_{V_3} [\vec{\pi} (\partial_\mu \vec{\pi}) (\partial_\mu \pi_3) - \pi_3 (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi})] \quad (2.57)$$

mit

$$c_{V_3} = \frac{1}{3} \frac{\rho_3}{F_0 \chi_0} - \frac{1}{3} \frac{\rho_3 \rho_0}{F_0 \chi_0^2} \quad (2.58)$$

ergibt sich ebenso nach der Symmetrisierung :

$$V_3^{a,b,c} = c_{V_3} (\delta_{a,b} \delta_{c,3} (p_a p_c + p_b p_c) + \delta_{a,c} \delta_{b,3} (p_a p_b + p_b p_c) + \delta_{b,c} \delta_{a,3} (p_a p_b + p_a p_c))$$

$$-2 c_{V_3} (\delta_{a,b} \delta_{c,3} p_a p_b + \delta_{a,c} \delta_{b,3} p_a p_c + \delta_{b,c} \delta_{a,3} p_b p_c) \quad (2.59)$$

Einschleifen-Integrale

In der Ordnung $\mathcal{O}(p^4)$ sind Diagramme mit der chiralen Dimension D=4 zu berücksichtigen. Dies sind zum einen Einschleifendiagramme aus \mathcal{L}_2 und zum anderen Tree-Level Diagramme aus \mathcal{L}_4 . Bei Betrachtung des Vierervertex trägt nur das in Abbildung 2.1 gezeigte Einschleifen-Diagramm zur Pion-Selbstenergie bei. Im Fall des Dreiervertex gibt es die in den Abbildungen 2.2 und 2.3 gezeigten Feynman-Diagramme, die Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ liefern.

Einschleifen-Integral mit dem Vierervertex $V_4^{a,b,c,d}$

Am einfachsten lässt sich der Beitrag des Feynman-Graphen aus Abbildung 2.1 zur Pion-Selbstenergie berechnen. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man damit in Gleichung (2.56) folgende Wahl der Parameter und Indizes des Vierervertex treffen :

1. In der Notation des letzten Abschnitts werden die Isospin-Indizes gewählt als :
 $a = i, b = j, c = j$ und $d = i$ wobei i den Isospin-Index des ein- bzw. auslaufenden Pions kennzeichnet.
2. Alle Impulse werden als einlaufend definiert. Das heißt konkret :
 $p_a = p, p_b = k, p_c = -k, p_d = -p$
3. Bei der Summation über die Schleifenimpulse ist zu berücksichtigen, dass im Fall der Pion-Felder (1) und (2) der Propagator noch durch den Faktor

$$K^{(1,2)} = 1 - \frac{\rho_3^2}{3\chi_0^2} + \mathcal{O}(\rho^3)$$

zu normieren ist.

$$V_4^{(i)} \equiv \frac{1}{K^{(1,2)}} (V_4^{i11i} + V_4^{i22i}) + V_4^{i33i} \quad (2.60)$$

Nach Summation über den Isospin-Index j der Schleife folgt damit insgesamt für $i = 1$ und $i = 2$:

$$V_4^{(1,2)} = \left(\frac{4}{3F_0^2} - \frac{26}{45} \frac{\rho_3^2}{F_0^2 \chi_0^2} \right) p^2 + \left(\frac{4}{3F_0^2} - \frac{2}{15} \frac{\rho_3^2}{F_0^2 \chi_0^2} \right) k^2 + \frac{5}{3} \frac{\chi_0 + \rho_0}{F_0^2} + \frac{61}{90} \frac{\rho_3^2}{F_0^2 \chi_0} \quad (2.61)$$

und für $i = 3$ gilt :

$$V_4^{(3)} = \left(\frac{4}{3F_0^2} + \frac{4}{15} \frac{\rho_3^2}{F_0^2 \chi_0^2} \right) p^2 + \left(\frac{4}{3F_0^2} - \frac{28}{45} \frac{\rho_3^2}{F_0^2 \chi_0^2} \right) k^2 + \frac{5}{3} \frac{\chi_0 + \rho_0}{F_0^2} + \frac{83}{90} \frac{\rho_3^2}{F_0^2 \chi_0} \quad (2.62)$$

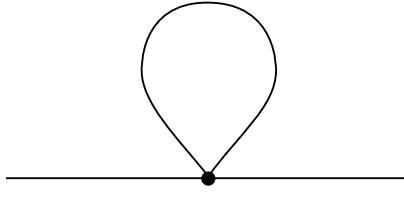


Abbildung 2.1: Schleifendiagramm mit Vierervertex

Das Diagramm in Abbildung 2.1 hat den Symmetriefaktor 2, so dass sich

$$\Sigma_{V_4}^{loop,(i)}(p^2) = \frac{1}{2} \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} V_4^{(i)} \frac{1}{k^2 + m_0^2} \quad (2.63)$$

ergibt, wobei mit $m_0^2 = \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0^2}$ die $\mathcal{O}(p^2)$ -Pion-Massen aus \mathcal{L}_2 bezeichnet werden. Dieses Integral ist divergent und lässt sich im Rahmen der dimensionellen Regularisierung auswerten. Es gilt :

$$I_{4,1}(m_0^2, \Lambda^2, \epsilon) = \Lambda^\epsilon \int \frac{d^{4-\epsilon} k}{(2\pi)^{4-\epsilon}} \frac{1}{k^2 + m_0^2} = \frac{m_0^2}{16\pi^2} \left[R + \log\left(\frac{m_0^2}{\Lambda^2}\right) \right] + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (2.64)$$

$$I_{4,2}(m_0^2, \Lambda^2, \epsilon) = \Lambda^\epsilon \int \frac{d^{4-\epsilon} k}{(2\pi)^{4-\epsilon}} \frac{k^2 + m_0^2}{k^2 + m_0^2} = 0 + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (2.65)$$

mit

$$R = -\frac{2}{\epsilon} - [\log(4\pi) - \gamma + 1] \quad (2.66)$$

Und damit erhält man das gesuchte Einschleifen-Integral für die Pion-Felder 1 und 2 :

$$\Sigma_{V_4}^{loop,(1,2)}(p^2) = \frac{1}{F_0^2} \left[\left(\frac{2}{3} - \frac{13}{45} \frac{\rho_3^2}{\chi_0^2} \right) p^2 + \frac{\chi_0 + \rho_0}{6} + \frac{13}{180} \frac{\rho_3^2}{\chi_0} \right] I_1(m_0^2, \Lambda^2, \epsilon) \quad (2.67)$$

Für das dritte Pion-Feld folgt :

$$\Sigma_{V_4}^{loop,(3)}(p^2) = \frac{1}{F_0^2} \left[\left(\frac{2}{3} + \frac{2}{15} \frac{\rho_3^2}{\chi_0^2} \right) p^2 + \frac{\chi_0 + \rho_0}{6} + \frac{79}{180} \frac{\rho_3^2}{\chi_0} \right] I_1(m_0^2, \Lambda^2, \epsilon) \quad (2.68)$$

Einschleifen-Integral (1) mit dem Dreiervertex $V_3^{a,b,c}$

Im Feynman-Diagramm aus Abbildung 2.2 treten zwei Dreiervertizes auf, so dass über das Produkt $V_3^{a,b,c} \cdot V_3^{d,e,f}$ nach geeigneter Wahl der Indizes und Parameter zu summieren ist. Auch hier kann man wieder ohne Beschränkung der Allgemeinheit in Gleichung (2.59) folgende Wahl treffen :

1. Die Isospin-Indizes werden gewählt als :

$a = i, b = j, c = l, d = j, e = l$ und $f = i$ wobei i den Isospin-Index des ein- bzw. auslaufenden Pions kennzeichnet.

2. Alle Impulse werden als einlaufend definiert. Das führt im Fall einer symmetrischen Parametrisierung des Schleifenimpulses auf :
 $p_a = p, p_b = k - \frac{p}{2}, p_c = -k - \frac{p}{2}, p_d = -k + \frac{p}{2}, p_e = k + \frac{p}{2}$ und $p_f = -p$
womit die Impulserhaltung an beiden Vertizes erfüllt ist.
3. Die Berücksichtigung des Faktors $F^{(1,2)}$ in den Schleifen führt zu Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$, was an dieser Stelle nicht weiter betrachtet werden muss, da der Dreiervertex selbst bereits von Ordnung der $\mathcal{O}(a)$ ist.

Nach Summation über die Isospin-Indizes j und l der Schleife folgt damit insgesamt :

$$V_{3,1}^{(i)} \equiv \sum_{j,l=1}^3 V_3^{i,j,l} \cdot V_3^{j,l,i} \quad (2.69)$$

$$V_{3,1}^{(1,2)} = c_{V_3}^2 \left[2 (k^2)^2 - 3 p^2 k^2 + 18 (p \cdot k)^2 + \frac{9}{8} (p^2)^2 \right] \quad (2.70)$$

$$V_{3,1}^{(3)} = c_{V_3}^2 \left[8 (k^2)^2 - 12 p^2 k^2 + \frac{9}{2} p^2 \right] \quad (2.71)$$

und

$$c_{V_3} = \frac{1}{3} \frac{\rho_3}{F_0 \chi_0} - \frac{1}{3} \frac{\rho_3 \rho_0}{F_0 \chi_0^2}$$

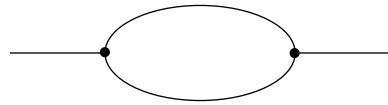


Abbildung 2.2: Schleifendiagramm (1) mit Dreiervertex

Das zugehörige Schleifen-Integral ist divergent und lautet (Symmetriefaktor 2) :

$$\Sigma_{V_{3,1}}^{loop,(i)}(p^2) = \frac{1}{2} \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{V_{3,1}^{(i)}}{\left((k - \frac{p}{2})^2 + m_0^2\right) \left((-k - \frac{p}{2})^2 + m_0^2\right)} \quad (2.72)$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^1 dx \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{V_{3,1}^{(i)}}{(-2x p \cdot k + p \cdot k + k^2 + \frac{1}{4} p^2 + m_0^2)^2} \quad (2.73)$$

Mit Hilfe der Feynman-Parametrisierung lässt sich der Nenner dieses Integrals auf Standardform bringen. Ein Teil der hierbei auftretenden Integrale lautet in dimensioneller Regularisierung

sierung [17, 18] :

$$\begin{aligned} I_{3,0}(M^2, \Lambda^2, \epsilon) &= \Lambda^\epsilon \int \frac{d^{4-\epsilon}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} \frac{1}{(k^2 + M^2)^s} = \Lambda^\epsilon \frac{\pi^{\frac{4-\epsilon}{2}}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} (M^2)^{\frac{4-\epsilon}{2}-s} \frac{\Gamma(s - \frac{4-\epsilon}{2})}{\Gamma(s)} \\ &= \frac{1}{16\pi^2} \left\{ \frac{2}{\epsilon} - \gamma + \log(4\pi) - \log\left(\frac{M^2}{\Lambda^2}\right) \right\} + \mathcal{O}(\epsilon) \end{aligned} \quad (2.74)$$

$$I_{3,1}(M^2, \Lambda^2, \epsilon) = \Lambda^\epsilon \int \frac{d^{4-\epsilon}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} \frac{k_j}{(k^2 + M^2)^s} = 0 \quad (2.75)$$

$$\begin{aligned} I_{3,2}(M^2, \Lambda^2, \epsilon) &= \Lambda^\epsilon \int \frac{d^{4-\epsilon}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} \frac{k_j^2}{(k^2 + M^2)^s} = \Lambda^\epsilon \frac{\pi^{\frac{4-\epsilon}{2}}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} (M^2)^{\frac{4-\epsilon}{2}-s+1} \frac{1}{2} \frac{\Gamma(s - 1 - \frac{4-\epsilon}{2})}{\Gamma(s)} \\ &= -\frac{M^2}{32\pi^2} \left\{ \frac{2}{\epsilon} - \gamma + 1 + \log(4\pi) - \log\left(\frac{M^2}{\Lambda^2}\right) \right\} + \mathcal{O}(\epsilon) \end{aligned} \quad (2.76)$$

$$I_{3,3}(M^2, \Lambda^2, \epsilon) = \Lambda^\epsilon \int \frac{d^{4-\epsilon}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} \frac{k_j^3}{(k^2 + M^2)^s} = 0 \quad (2.77)$$

$$\begin{aligned} I_{3,4}(M^2, \Lambda^2, \epsilon) &= \Lambda^\epsilon \int \frac{d^{4-\epsilon}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} \frac{k_j^4}{(k^2 + M^2)^s} = \Lambda^\epsilon \frac{\pi^{\frac{4-\epsilon}{2}}}{(2\pi)^{4-\epsilon}} (M^2)^{\frac{4-\epsilon}{2}-s+2} 6 \frac{\Gamma(s - 2 - \frac{4-\epsilon}{2})}{\Gamma(s)} \\ &= \frac{3M^4}{16\pi^2} \left\{ \frac{2}{\epsilon} - \gamma + \frac{3}{2} + \log(4\pi) - \log\left(\frac{M^2}{\Lambda^2}\right) \right\} + \mathcal{O}(\epsilon) \end{aligned} \quad (2.78)$$

Einschleifen-Integral (2) mit dem Dreiervertex $V_3^{a,b,c}$

Ebenso wie bei dem Einschleifen-Integral (1) treten auch bei dem Feynman-Diagramm aus Abbildung 2.2 zwei Dreiervertizes auf, so dass auch hier wieder das Produkt $V_3^{a,b,c} \cdot V_3^{d,e,f}$ zu bilden ist, über das dann nach geeigneter Wahl der Indizes und Parameter zu summieren ist. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit in Gleichung (2.59) gilt hier :

1. Die Isospin-Indizes werden gewählt als :
 $a = i, b = i, c = j, d = j, e = l$ und $f = l$ wobei i den Isospin-Index des ein- bzw. auslaufenden Pions kennzeichnet.
2. Bei Definition aller Impulse als einlaufend gilt :
 $p_a = p, p_b = -p, p_c = 0, p_d = 0, p_e = k$ und $p_f = -k$
3. Die Berücksichtigung des Faktors $F^{(1,2)}$ in den Schleifen führt zu Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$, was an dieser Stelle nicht weiter betrachtet werden muss, da der Dreiervertix selbst bereits von Ordnung der $\mathcal{O}(a)$ ist.

Nach Summation über die Isospin-Indizes j und l folgt damit insgesamt :

$$V_{3,2}^{(i)} \equiv \sum_{j,l=1}^3 V_3^{i,j,l} \cdot V_3^{j,l,i} \quad (2.79)$$

$$V_{3,2}^{(1,2)} = 8 c_{V_3}^2 k^2 p^2, \quad V_{3,2}^{(3)} = 0 \quad (2.80)$$

und

$$c_{V_3} = \frac{1}{3} \frac{\rho_3}{F_0 \chi_0} - \frac{1}{3} \frac{\rho_3 \rho_0}{F_0 \chi_0^2}$$

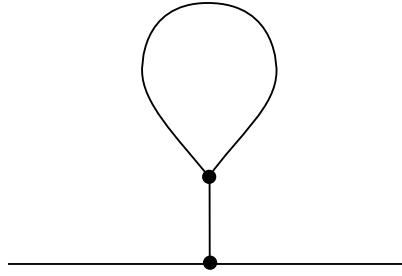


Abbildung 2.3: Schleifendiagramm (2) mit Dreiervertex

Da die hier skizzierten Rechnungen ausgesprochen lang sind und bei der Berechnung der Integrale einige Schwierigkeiten auftreten, wird dieser Ansatz nicht weiter verfolgt, sondern mit einer sehr viel günstigeren Parametrisierung der Felder gearbeitet.

2.4.2 Reparametrisierung der Felder

Wählt man nun eine symmetrische Parametrisierung der Pion-Felder :

$$U = e^{\frac{i}{2F_0}(\tilde{\pi}_3 \tau_3)} e^{\frac{i}{F_0}(\pi_a \tau_a)} e^{\frac{i}{2F_0}(\tilde{\pi}_3 \tau_3)} \quad (2.81)$$

so lässt sich das Ergebnis der Loop-Rechnungen durch eine einfache Substitution bestimmen. Wichtig zu erwähnen ist an dieser Stelle, dass die hier auch mit π_a bezeichneten Pion-Felder nicht mit den Feldern in der alten Parametrisierung identisch sind, die im vorhergehenden Abschnitt verwendet wurde. Beide Definitionen für die Pion-Felder lassen durch eine nicht-lineare Transformation gegenseitig ineinander überführen. Dabei lässt sich feststellen, dass es sich in erster, also linearer Ordnung, bei der Transformationsvorschrift um die identische Abbildung handelt. Erst in Termen, die von höherer Ordnung in den Feldern sind, ergeben sich Unterschiede zwischen den beiden ansonsten äquivalenten Darstellungen. Dass beide Darstellungen auch tatsächlich völlig gleichwertig sind, lässt sich mit Hilfe einer expliziten Darstellung der Transformation nachweisen. Da die genaue Form dieser Gleichungen jedoch für die folgenden Rechnungen nicht relevant ist, wird an dieser Stelle darauf verzichtet, die doch sehr umfangreichen Gleichungen zu präsentieren.

Im Kontinuum ergeben sich aus der \mathcal{L}_2 Lagrange-Dichte folgende Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\pi_i^4)$:

$$\mathcal{L}_2^{cont} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) - F_0^2 \chi_0 + \frac{\chi_0}{2} \vec{\pi}^2 - \frac{\chi_0}{24F_0^2} (\vec{\pi}^2)^2 \quad (2.82)$$

Analog zu dem in den letzten Anschnitten erläuterten Verfahren ergibt sich aus dem Wechselwirkungsterm

$$\mathcal{L}_2^{cont,WW} = -\frac{\chi_0}{24F_0^2} (\vec{\pi}^2)^2 \equiv -\frac{\mu_0^2}{24F_0^2} (\vec{\pi}^2)^2 \quad (2.83)$$

folgender Beitrag zur Pion-Selbstenergie mit $\chi_0 = \mu_0^2$:

$$\Sigma = \frac{1}{6F_0^2} (4p^2 + \mu_0^2) I(\mu_0^2, \Lambda^2, \epsilon) \quad (2.84)$$

bei der Renormierungsskala Λ mit :

$$I(\mu_0^2, \Lambda^2, \epsilon) = \frac{\mu_0^2}{16\pi^2} \left[R + \log\left(\frac{\mu_0^2}{\Lambda^2}\right) \right] + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (2.85)$$

Im Ergebnis wurde die divergente Konstante R eingeführt, für die gilt :

$$R = -\frac{2}{\epsilon} - [\log(4\pi) - \gamma + 1] \quad (2.86)$$

Für die hier betrachtete Twisted-Mass Gitter QCD folgt nun nach Einsetzen des Minimums in die Definition von U für die Terme aus \mathcal{L}_2 :

$$\mathcal{L}_2 = \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi}) - F_0^2 \left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} \right) + \frac{\left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} \right)}{2} \vec{\pi}^2 - \frac{\left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} \right)}{24F_0^2} (\vec{\pi}^2)^2 \quad (2.87)$$

Es ist offensichtlich, dass der Wechselwirkungsterm

$$\mathcal{L}_2^{WW} = -\frac{\left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} \right)}{24F_0^2} (\vec{\pi}^2)^2 \equiv -\frac{m_0^2}{24F_0^2} (\vec{\pi}^2)^2 \quad (2.88)$$

die gleiche Struktur besitzt wie im Kontinuum, so dass man den Beitrag zur Pion-Selbstenergie sofort ablesen kann :

$$\Sigma = \frac{1}{6F_0^2} (4p^2 + m_0^2) I(m_0^2, \Lambda^2, \epsilon) \quad (2.89)$$

$$I(m_0^2, \Lambda^2, \epsilon) = \frac{m_0^2}{16\pi^2} \left[R + \log\left(\frac{m_0^2}{\Lambda^2}\right) \right] + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (2.90)$$

wobei $m_0^2 = \left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} \right)$ ist.

2.4.3 Ergebnisse für die Pion-Massen

Die Masse der Pionen wird hier definiert als die Polstelle des Propagators beziehungsweise als Nullstelle des inversen Propagators :

$$G^{-1,(i)}(p^2) = p^2 + m_0^2 - \Sigma^{(i)}(p^2) \quad (2.91)$$

Zusätzlich zu den Tree-Level Beiträgen sind nun auch die Einschleifen-Korrekturen zu be-

rücksichtigen. In der bisherigen Notation nimmt der inverse Propagator folgende Gestalt an :

$$G^{-1,(i)}(p^2) = A^{(i)} p^2 + B^{(i)} \quad (2.92)$$

Für die Nullstelle $M_{(i)}^2$ des inversen Propagators mit $p = (iM_{(i)}, 0, 0, 0)$ folgt :

$$0 = -A^{(i)} M_{(i)}^2 + B^{(i)} \quad (2.93)$$

und damit

$$M_{(i)}^2 = \frac{B^{(i)}}{A^{(i)}} + \mathcal{O}(a^3) \quad (2.94)$$

Die in den Loop-Termen auftauchenden divergenten Anteile proportional zu R können nun, wie durch das Power-Counting-Argument vorhergesagt, durch eine Renormierung geeigneter Koeffizienten von Tree-Level Termen aus \mathcal{L}_4 absorbiert werden.

$$L_i^r = L_i + \frac{\Gamma_i}{32\pi^2} R \quad (2.95)$$

$$W_i^r = W_i + \frac{\Delta_i}{32\pi^2} R \quad (2.96)$$

$$W_i'^r = W_i' + \frac{\Delta'_i}{32\pi^2} R \quad (2.97)$$

Nun müssen die Konstanten Γ_i , Δ_i und Δ'_i so gewählt werden, dass sie die entsprechenden divergenten Loop-Terme vollständig absorbieren. Allerdings ist man in der Wahl dieser Konstanten nicht völlig frei, sondern es ist zu berücksichtigen, dass nicht nur die Ergebnisse für die Massen mit dieser Wahl der Parameter korrekt renormiert werden. Vielmehr ist zu fordern, dass das gewählte Renormierungs-Schema auf alle Ergebnisse aus der Chiralen Störungstheorie in Ordnung $\mathcal{O}(p^4)$ und $\mathcal{O}(a^2)$ angewendet werden kann. Im Kontinuum wurden die zu den L_i gehörenden Koeffizienten Γ_i zuerst von Gasser und Leutwyler berechnet [6] :

$$\begin{aligned} \Gamma_4 &= \frac{1}{8}, & \Gamma_5 &= \frac{2}{8}, & \Gamma_6 &= \frac{3}{32}, & \Gamma_8 &= 0 \\ \Delta_4 &= \frac{1}{8}, & \Delta_5 &= \frac{2}{8}, & \Delta_6 &= \frac{3}{16}, & \Delta_8 &= 0 \\ \Delta'_6 &= \frac{3}{32}, & \Delta'_8 &= 0 \end{aligned} \quad (2.98)$$

Die übrigen Koeffizienten für allgemeine N_f sind zu finden in [23].

Nach Entwicklung des Nenners folgt für die renormierten Pion-Massen :

$$\begin{aligned} M_{(1,2)}^2 &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{(-8L_{54}^r + 16L_{86}^r)\chi_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54}^r - 8L_{54}^r + 16W_{86}^r)\chi_0\rho_0}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{(-8W_{54}^r + 16W_{86}^r)\rho_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54}^r - 16L_{86}^r + 16W_{86}^r)\rho_3^2}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{\left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0}\right)^2}{32\pi^2 F_0^2} \log\left(\frac{\left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0}\right)^2}{\Lambda^2}\right) + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2\rho, \chi\rho^2, \rho^3) \end{aligned} \quad (2.99)$$

$$\begin{aligned}
M_{(3)}^2 = & \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{(-8L_{54}^r + 16L_{86}^r)\chi_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54}^r - 8L_{54}^r + 16W_{86}^r)\chi_0\rho_0}{F_0^2} \\
& + \frac{(-8W_{54}^r + 16W'_{86}^r)\rho_0^2}{F_0^2} + \frac{(-8W_{54}^r - 16W'_{86}^r - 32L_{86}^r + 32W_{86}^r)\rho_3^2}{F_0^2} \\
& + \frac{\left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0}\right)^2}{32\pi^2 F_0^2} \log\left(\frac{\left(\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0}\right)^2}{\Lambda^2}\right) + \mathcal{O}(\chi^3, \chi^2\rho, \chi\rho^2, \rho^3)
\end{aligned} \tag{2.100}$$

Kapitel 3

Auswertung der Gitter-QCD Simulation

Die Twisted-Mass Gitter-QCD Simulationen, die von F. Farchioni, K. Jansen, E. Scholz, I. Montvay, L. Scorzato, A. Shindler, N. Ukita, C. Urbach und I. Wetzorke durchgeführt wurden [35], haben Ergebnisse für Meson-Massen und Zerfallskonstanten geliefert, die sich mit Hilfe der Gleichungen der Chiralen Störungstheorie auswerten lassen. Allerdings ergibt sich hierbei die Schwierigkeit, dass die numerischen Simulationen in einer anderen Basisdarstellung durchgeführt wurden, als unsere analytischen Rechnungen. Aus diesem Grund nun eine kurze Übersicht der wichtigsten Relationen.

3.1 Definitionen

Der Unterschied zwischen der sogenannten *Physical*- und *Twisted-Basis* besteht in einer chiralen Transformation des Koordinatensystems im Flavour-Raum. Während in der Twisted-Basis der Gitterterm diagonal und der Massenterm um eine sogenannte Twist-Mass ergänzt ist, wird die Drehung in der Physical-Basis gänzlich auf den Gitterterm übertragen. Alle hier aufgeführten Relationen entsprechen der Notation in [24].

3.1.1 Twisted-Basis

In der QCD mit $N_f = 2$ Quark-Flavours kann man eine axial gedrehte Massenmatrix einführen :

$$\chi(\omega) = 2B_0 m_{q0} e^{-i\omega\gamma_5\tau_3} = 2B_0 \tilde{m} - i2B_0 \mu \tau_3 \quad (3.1)$$

$$m_{q0} = \sqrt{\tilde{m}^2 + \mu^2}, \quad \tilde{m} = m_{q0} \cos(\omega), \quad \mu = m_{q0} \sin(\omega) \quad (3.2)$$

Hier wird die Bezeichnung $m_{q0} \equiv m$ verwendet, wobei m die nicht renormierte Quark-Masse aus den vorherigen Kapiteln ist. Für den Gitterterm gilt :

$$\rho = 2W_0 a, \quad \rho > 0 \quad (3.3)$$

so dass sich für den symmetriebrechenden Anteil insgesamt ergibt :

$$\chi' = \chi(\omega) + \rho = 2B_0\tilde{m} - i2B_0\mu\tau_3 + 2W_0a \quad (3.4)$$

$$\chi'_0 = 2B_0\tilde{m} + 2W_0a, \quad \chi'_3 = -2B_0\mu \quad (3.5)$$

Mit diesen Definitionen befindet sich der Phasenübergang bei $\chi'_0 = 0$, was auf den folgenden Seiten näher erläutert wird.

Der wesentliche Parameter, der in den hier durchgeführten Gitter-QCD Simulationen variiert wird, ist die nackte Quark-Masse m_0 auf dem Gitter, die mit dem Hopping-Parameter κ verknüpft ist :

$$a m_0 = \frac{1}{2\kappa} - 4 \quad (3.6)$$

Diese entspricht, bis auf einen Renormierungsfaktor, der hier in der Definition von B_0 versteckt wird, der nackten Quark-Masse in der Chiralen Störungstheorie.

$$\chi'_0 = 2B_0\tilde{m} + 2W_0a \equiv 2B_0m'_0 = 2B_0(m_0 - m_c) \quad (3.7)$$

3.1.2 Physical-Basis

Durch die axiale Transformation der Felder

$$\psi' = e^{i\omega\gamma_5\tau_3/2}\psi \quad (3.8)$$

lässt sich die Drehung der Massenmatrix vollständig auf den Gitterterm übertragen :

$$\chi = 2B_0m_{q0} = \chi_0 \quad (3.9)$$

$$\rho(\omega) = 2W_0a e^{i\omega\tau_3} = \rho_0 + i\rho_3\tau_3 \quad (3.10)$$

wobei m die nicht renormierte Quark-Masse aus den vorherigen Kapiteln ist. Weiterhin gilt :

$$\rho_0 = 2W_0a \cos(\omega), \quad \rho_3 = 2W_0a \sin(\omega) \quad (3.11)$$

$$\rho = 2W_0a = \sqrt{\rho_0^2 + \rho_3^2} \quad (3.12)$$

Somit folgt für den symmetriebrechenden Term in dieser Darstellung :

$$\chi^* = \chi + \rho(\omega) = \chi_0 + \rho_0 + i\tau_3\rho_3 = e^{i\omega\tau_3/2}\chi'e^{i\omega\tau_3/2} \quad (3.13)$$

$$|\chi^*| = |\chi'| \quad (3.14)$$

Eine sinnvolle Abkürzung ist außerdem :

$$2B_0m_q \equiv |\chi^*| = \sqrt{(\chi_0^2 + \rho_0^2)^2 + \rho_3^2} = \sqrt{\chi'^2_0 + \chi'^2_3} \quad (3.15)$$

3.1.3 Zusammenhang der Basis-Darstellungen

Am einfachsten lassen sich die oben eingeführten Größen in den beiden verschiedenen Basis-Darstellungen anhand einer Skizze veranschaulichen :

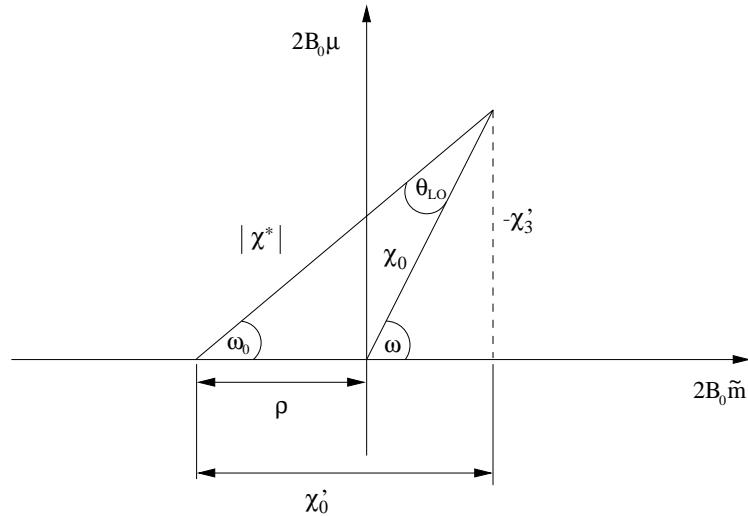


Abbildung 3.1: Twisted-Basis

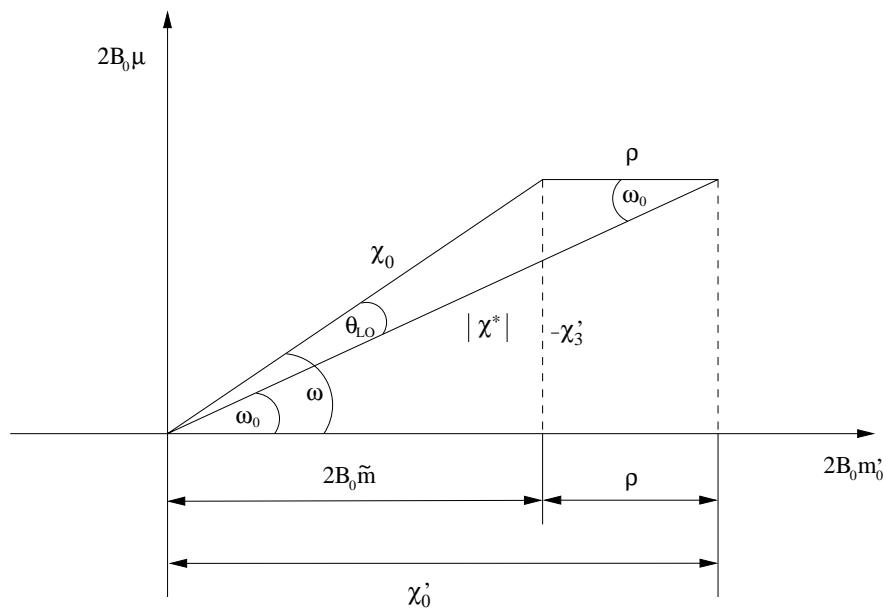


Abbildung 3.2: Twisted-Basis

Entscheidend ist an dieser Stelle, dass sich die Definition der beiden Drehwinkel um Terme der Ordnung $\mathcal{O}(a)$ unterscheiden :

$$\omega = \arctan\left(\frac{\rho_3}{\rho_0}\right), \quad \omega_0 = \arctan\left(\frac{\chi'_3}{\chi'_0}\right) = \omega + \mathcal{O}(a) \quad (3.16)$$

Für die folgenden Betrachtungen kann man die Quark-Masse m_q als positiv annehmen :

$$\chi_0 = 2B_0 m_{q0} > 0 \quad (3.17)$$

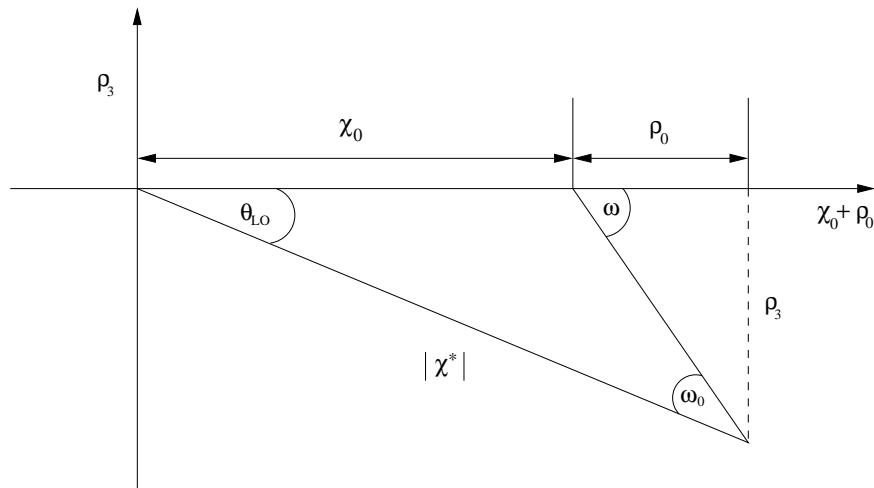


Abbildung 3.3: Physical-Basis

denn für $\chi_0 < 0$ bzw. $m_{q0} < 0$ gilt :

$$\begin{aligned}\chi(\omega) &\equiv 2B_0(\tilde{m} - i\mu\tau_3) = 2B_0m_{q0}e^{-i\omega\tau_3} = \chi_0e^{-i\omega\tau_3} \\ &= -\chi_0e^{-i(\omega+\pi)\tau_3} = \chi_0^-e^{-i\omega^-\tau_3}\end{aligned}\quad (3.18)$$

Damit ist gezeigt, dass sich durch eine andere Wahl des Twist-Winkels nach Umbenennung der Größen $\omega \rightarrow \omega^-$ immer $\chi_0 \rightarrow \chi_0^- > 0$ erreichen lässt.

3.2 Verhalten am Phasenübergang

Sowohl numerische [12] als auch theoretische [25, 26] Untersuchungen zeigen, dass für den Fall $N_f = 2$ mit massendegenerierten Quarks bei mittlerer bis schwacher Kopplung, also $c_2 < 0$ [26], in der χ_0 - μ -Ebene der Massen ein vertikal verlaufender Phasenübergang erster Ordnung existiert. Zwischen den beiden Endpunkten, deren Distanz $2\mu_c = \frac{2|c_2|}{F_0^2 B_0}$ proportional zu a^2 ist, erfährt die Position der Vakuumorientierung, die durch u_0 [25] analog zu (2.7) bestimmt wird, einen Vorzeichenwechsel bei der Überquerung der Phasenübergangslinie. Das chirale Kondensat macht hierbei einen Sprung um $-4F_0^2 B_0$. Oberhalb beziehungsweise unterhalb dieser beiden Endpunkte zweiter Ordnung, in denen die Masse des neutralen Pions verschwindet, findet ein kontinuierlicher Übergang statt. Diese auch als „normales Szenario“ bezeichnete Situation ist der Ausgangspunkt aller hier folgenden Untersuchungen.

Für eine numerische Simulation ist es nun wichtig, durch eine geeignete Wahl der Wirkung eine möglichst kurze Phasenübergangslinie zu erreichen, da in der Nähe der beiden Endpunkte zweiter Ordnung sowohl Metastabilitäten auftreten, als auch das Problem des *Critical-Slowing-Down*. Die Arbeiten in [35] zeigen, dass die Wahl der DBW2-Wirkung in dieser Hinsicht deutliche Vorteile im Vergleich zur Wilson-Wirkung mit sich bringt. Aus diesem Grund basieren die Analysen in diesem Kapitel ausschließlich auf Simulationsergebnissen, die unter Verwendung der DBW2-Wirkung erzielt wurden.

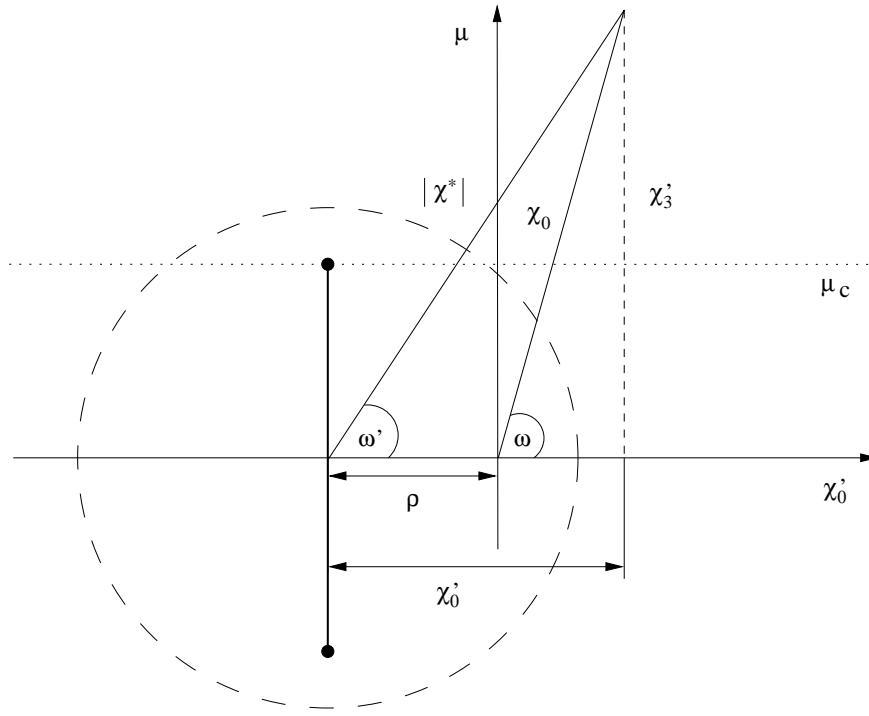


Abbildung 3.4: Verhalten am Phasenübergang mit $\frac{\rho}{\chi} \ll 1$

3.2.1 Diskontinuität in der Vakuumorientierung

Vor der Berechnung der eigentlich interessierenden Größen wie Pion-Masse und Zerfallskonstante in der Twisted-Basis ist es zunächst notwendig, sich klarzumachen, was am Phasenübergang geschieht. In [15] wurden in der sogenannten Physical-Basis Ergebnisse für die Orientierung des Vakuums bis einschließlich NLO angegeben. Entscheidend ist, dass im Gegensatz zu unseren Rechnungen die Ergebnisse in [15] für beliebige Werte von

$$\eta \equiv \frac{\rho}{\chi_0} \quad (3.19)$$

Gültigkeit besitzen, also auch in der Nähe des Phasenübergangs. Durch Vergleich mit unseren Resultaten in der Approximation $\eta \ll 1$ lässt sich auch der Gültigkeitsbereich unserer Näherung abschätzen. In führender Ordnung ist der Winkel

$$\frac{\tilde{\pi}_3}{\chi_0} = \theta_{LO} = \tan^{-1} \left(\frac{\eta \sin(\omega)}{\eta \cos(\omega) + 1} \right) + \begin{cases} 0 & \text{falls } 1 + \eta \cos(\omega) > 0 \\ \pi & \text{falls } 1 + \eta \cos(\omega) < 0, \sin(\omega) > 0 \\ -\pi & \text{falls } 1 + \eta \cos(\omega) < 0, \sin(\omega) < 0 \end{cases} \quad (3.20)$$

Der Zusammenhang mit den beiden Drehwinkeln ω und ω_0 ist einfach gegeben durch :

$$\theta_{LO} = \omega - \omega_0 \quad (3.21)$$

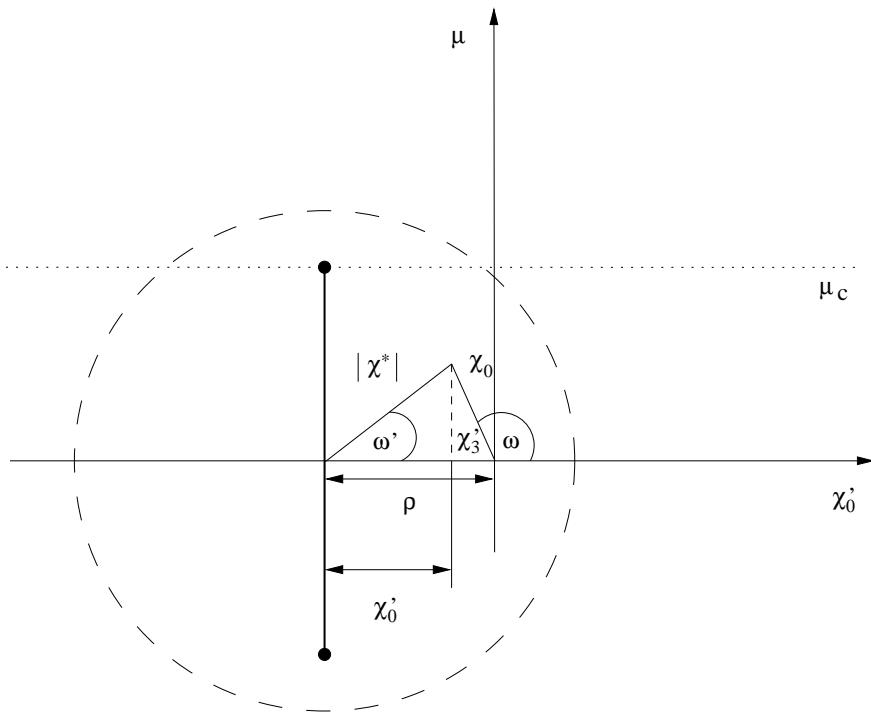


Abbildung 3.5: Verhalten am Phasenübergang mit $\frac{\rho}{\chi} > 1$

und in nächst-führender Ordnung :

$$\begin{aligned} \theta_{NLO} &= \theta_{LO} - \frac{8\chi_0^2 \sin \left\{ 2 \tan^{-1} \left(\frac{\eta \sin(\omega)}{\eta \cos(\omega) + 1} \right) \right\}}{F_0^2 \sqrt{\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1}} L_{86} \\ &\quad + \frac{8\chi_0^2 \sin \left\{ \omega - 2 \tan^{-1} \left(\frac{\eta \sin(\omega)}{\eta \cos(\omega) + 1} \right) \right\}}{F_0^2 \sqrt{\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1}} W_{86\eta} \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$+ \frac{8\chi_0^2 \sin \left\{ 2\omega - 2 \tan^{-1} \left(\frac{\eta \sin(\omega)}{\eta \cos(\omega) + 1} \right) \right\}}{F_0^2 \sqrt{\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1}} W'_{86\eta^2} \quad (3.23)$$

wobei die Konvention $Image(\tan^{-1}) = [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ verwendet wurde. Der Koeffizient c_1 des Sharpe-Singleton Potentials ist dabei

$$c_1 = (\chi_0 + \rho_0) F_0^2 = \chi_0 (1 + \eta \cos(\omega)) F_0^2 \quad (3.24)$$

In der Physical-Basis kommt es bei $c_1 = 0$ zu einem Phasenübergang erster Ordnung, wobei der Winkel θ_{LO} der Vakuumorientierung einen Sprung um $\pm\pi$ macht, abhängig vom Vorzeichen von $\sin(\omega)$.

3.2.2 Gültigkeitsbereich von $\eta \ll 1$ und Phasenübergang

Allerdings kann der Fall $1 + \eta \cos(\omega) < 0$ nur dann eintreten, wenn $\chi_0 < -\rho_0$, also auch $\chi < \rho$ ist und dies ist in der von uns gemachten Approximation $\eta \ll 1$ gar nicht möglich,

was in der Abbildung (3.4) veranschaulicht wird. Diese Diskontinuität in θ_{LO} tritt nämlich nur dann auf, wenn gleichzeitig $\chi'_3 = \chi_0 \sin(\omega) < 2B_0\mu_c$ erfüllt ist, was aber im Widerspruch zur Annahme kleiner Gitter-Artefakte $\eta \ll 1$ steht. Oberhalb μ_c beziehungsweise unterhalb von $-\mu_c$ findet dagegen ein stetiger Übergang statt. Dieses Verhalten lässt sich auch durch eine Taylor-Entwicklung von θ_{LO} in $\eta \ll 1$ überprüfen :

$$\theta_{LO} = \eta \sin(\omega) - \eta^2 \cos(\omega) \sin(\omega) = \frac{1}{\chi_0} \left[\rho_0 - \frac{\rho_0 \rho_3}{\chi_0} \right] \quad (3.25)$$

was mit unserem Resultat übereinstimmt. Ebenso lässt sich durch Taylor-Entwicklung von θ_{NLO} in η die Übereinstimmung mit unseren Ergebnissen zeigen. Für $\eta \ll 1$ tritt keine Diskontinuität in θ_{NLO} auf, so dass unsere Gleichungen in dieser Approximation beidseits des Phasenübergangs gültig sind.

Die Länge der Phasenübergangslinie $2|2B_0\mu_c|$ ist dabei von Ordnung a^2 [25] und schrumpft damit im Kontinuumslimes auf einen Punkt zusammen. Somit kann diese Linie nur im Fall $\eta \approx 1$ zwischen den beiden Endpunkten bei $\pm\mu_c$ überquert werden. In diesem Fall aber verliert unsere Näherung $\eta \ll 1$ ihre Gültigkeit [35]. Der Bereich in dem dies geschieht, ist in den Abbildungen (3.4) und (3.5) durch einen Kreis angedeutet. Außerhalb dieses Gebietes gilt aber wieder $\eta \ll 1$, so dass unsere Ergebnisse auch links des Phasenübergangs korrekt sind.

Im Abschnitt (3.4.2) wird explizit gezeigt, dass die Ergebnisse in [27], die direkt in der Twisted-Basis angegeben sind, nach Übersetzung der Notation tatsächlich mit unseren übereinstimmen. Offenbar gilt auch für die Pion-Massen-Resultate in [27] $\chi > \rho$.

3.2.3 Implikationen für die Auswertung der Simulation

Problematisch für die Auswertung der Monte-Carlo-Simulationen ist nun die Tatsache, dass die einfachen Gleichungen für die Pion-Masse und Pion-Zerfallskonstante nur im Limes $\eta \ll 1$ gültig sind. Es ist fraglich, ob diese Bedingung tatsächlich für alle Datenpunkte erfüllt ist. Gerade jene Punkte mit $\chi'_0 \approx 0$, das sind solche Punkte für die $m_{\pi^\pm}^2$ sehr klein wird, korrespondieren zu sehr kleinen Werten von χ da ja gilt :

$$\chi = \sqrt{\chi_0'^2 + \chi_3'^2} \approx |\chi'_3| = 2B_0 |\mu| \quad \text{falls} \quad \chi'_0 \approx 0 \quad (3.26)$$

Die Antwort auf diese Frage ist aber wiederum in den Resultaten der Gitter-Simulation zu suchen. Erweisen sich die Gitter-Artefakte als klein genug im Vergleich zur Twist-Masse, so kann weiterhin $\rho \lesssim \chi \approx 2B_0 |\mu|$ angenommen werden und die Gleichungen behalten ihre Gültigkeit. Gilt dies aber nicht, so darf man in dem Ergebnis aus [15] für die Pion-Masse nicht in η entwickeln :

$$\begin{aligned} \frac{m_\pi^2}{F_0^2} = & \frac{\chi_0 \sqrt{(\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1)}}{F_0^2} + \frac{|\chi^*|^2}{32\pi^2 F_0^2} \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} + 16 \frac{\chi_0^2 (\eta \cos(\omega) + 1)^2 L_{86}}{F_0^4 (\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1)} \\ & - \frac{\chi_0^2 (8 \cos(2\omega) \eta^2 + 16\eta^2 + 8(\eta^2 + 3) \cos(\omega) \eta + 8) L_{54}}{F_0^4 (\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1)} \\ & - 8 \frac{\chi_0^2 \eta (\eta + \cos(\omega)) (-2\eta \cos(\omega) - 2) W_{86}}{F_0^4 (\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1)} \\ & - 8 \frac{\chi_0^2 \eta (\eta + \cos(\omega)) W_{54}}{F_0^4} + 16 \frac{\chi_0^2 \eta^2 (\eta + \cos(\omega))^2 W'_{86}}{F_0^4 (\eta^2 + 2\eta \cos(\omega) + 1)} \end{aligned} \quad (3.27)$$

An dieser Stelle handelt es sich bei den L_{ij} und W_{ij} bereits um die renormierten Niederenergie-Koeffizienten. Für die Auswertung der Daten ist es sinnvoll, dieses Resultat mit Hilfe trigonometrischer Umformungen zu vereinfachen und als Funktion von

$$M' \equiv |\chi^*| = \sqrt{\chi_0^2 + 2\chi_0 \rho \cos(\omega) + \rho^2} \quad (3.28)$$

auszudrücken.

$$\begin{aligned} M_\pi^2 = & |\chi^*| + \frac{|\chi^*|^2}{32\pi^2 F_0^2} \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} + \frac{(16L_{86} - 8L_{54}) |\chi^*|^2}{F_0^2} \\ & + \frac{(8L_{54} + 16W_{86} - 8W_{54} - 32L_{86}) \cos(\omega) \chi_0 \rho}{F_0^2} \\ & + \frac{(8L_{54} + 16W_{86} - 8W_{54} - 32L_{86} + (16L_{86} + 16W'_{86} - 16W_{86}) \cos^2 \omega) \rho^2}{F_0^2} \\ & + \frac{((-32L_{86} + 32W_{86} - 32W'_{86}) \cos^3 \omega + (32L_{86} - 32W_{86} + 32W'_{86}) \cos(\omega)) \chi_0 \rho^3}{|\chi^*|^2 F_0^2} \\ & + \frac{((-16L_{86} + 16W_{86} - 16W'_{86}) \cos^2 \omega + 16L_{86} + 16W'_{86} - 16W_{86}) \rho^4}{|\chi^*|^2 F_0^2} \end{aligned} \quad (3.29)$$

In dem Bereich, in dem die Chirale Störungstheorie angewendet werden darf, muss folgende Beziehung für alle Niederenergie-Koeffizienten X gelten :

$$\frac{\chi_0 X}{F_0^2} \ll 1 \quad \text{und} \quad \frac{\rho X}{F_0^2} \ll 1 \quad (3.30)$$

so dass für alle Datenpunkte der wesentliche Beitrag zur Masse durch den Term $|\chi^*|$ gegeben ist, was auch durch die spätere Analyse bestätigt wird. Die relative Größe der NLO-Beiträge lässt sich erst sicher aus der numerischen Auswertung der Ergebnisse ablesen.

3.2.4 Überprüfung der Gültigkeit des Power-Countings bis $\mathcal{O}(p^4)$

Eine wichtige Frage, die es im Zusammenhang mit den Ergebnissen der Chiralen Störungstheorie in Nähe des Phasenübergangs zu klären gibt, ist die Gültigkeit des etablierten Power-Counting-Schemas. Da es sich bei dem Minimum des Potentials bis NLO um die Lösung einer quartischen Gleichung handelt, wäre es durchaus möglich, dass hier das bisher verwendete Power-Counting-Schema nicht mehr anwendbar ist. Konkret könnte es also passieren, dass es

nötig würde, im Ergebnis für das Minimum des Potentials bis NNLO gehen zu müssen, um beispielsweise die Pion-Masse bis NLO sicher angeben zu können. Um dies zu überprüfen, ist es nötig, den Effekt eines zusätzlichen NNLO-Terms in der Lagrange-Dichte zu untersuchen. Hier wird der Einfluss von

$$\begin{aligned} V_{\chi}^{NNLO} = & \alpha \langle \chi U + U^\dagger \chi \rangle^3 + \beta \langle \chi U + U^\dagger \chi \rangle^2 \langle \rho^\dagger U + U^\dagger \rho \rangle \\ & + \gamma \langle \chi U + U^\dagger \chi \rangle \langle \rho^\dagger U + U^\dagger \rho \rangle^2 \end{aligned} \quad (3.31)$$

betrachtet. Bei α , β und γ handelt es sich, ebenso wie bei den L_{ij} und W_{ij} , um dimensionslose Kopplungs-Parameter. Dieser Term repräsentiert die Klasse aller relevanten NNLO-Beiträge, die hier aber nicht im Einzelnen betrachtet werden müssen. Für das Minimum U_0 des Potentials wird folgende Parametrisierung gewählt :

$$U_0 = \mathbf{1}_2 \cos \theta + i \tau_3 \sin \theta \quad (3.32)$$

wobei berücksichtigt wurde [15], dass die Verschiebung des Minimums bei dem hier gewählten gedrehten Massenterm nur in τ_3 -Richtung erfolgt. In dieser Parametrisierung ist das Potential unter Vernachlässigung konstanter Beiträge nun proportional zu :

$$V_{\chi}^{LO} = -\cos \theta - \eta \cos \omega \cos \theta - \eta \sin \omega \sin \theta \quad (3.33)$$

$$V_{\chi}^{NLO} = 4\chi \cos(2\theta) L_{86} - 4\chi \eta \cos(2\theta - \omega) W_{86} - \chi \eta^2 \{1 + 4 \cos(2\theta - 2\omega)\} W'_{86} \quad (3.34)$$

Im Vergleich zu dem Ergebnis in [15] wurde V_{χ}^{NLO} durch Anwendung trigonometrischer Umformungen hier erheblich vereinfacht. Insgesamt wird nun das Minimum von

$$V_{\chi} = V_{\chi}^{LO} + V_{\chi}^{NLO} + V_{\chi}^{NNLO} \quad (3.35)$$

untersucht. V_{χ}^{NNLO} ist wieder unter Vernachlässigung konstanter Terme proportional zu :

$$\begin{aligned} V_{\chi}^{NNLO} = & \alpha \chi^2 \cos(2\theta) \cos \theta + \beta \chi^2 \eta \cos(2\theta - \omega) \cos \theta \\ & - \gamma \chi^2 \eta^2 \{1 + 4 \cos(2\theta - 2\omega)\} \cos \theta \end{aligned} \quad (3.36)$$

Um die volle Lösung θ_{min} zu erhalten, wird um das Minimum in führender Ordnung entwickelt :

$$\theta_{LO} = \tan^{-1} \left(\frac{\eta \sin(\omega)}{\eta \cos(\omega) + 1} \right) + \begin{cases} 0 & \text{falls } 1 + \eta \cos(\omega) > 0 \\ \pi & \text{falls } 1 + \eta \cos(\omega) < 0, \sin(\omega) > 0 \\ -\pi & \text{falls } 1 + \eta \cos(\omega) < 0, \sin(\omega) < 0 \end{cases}$$

Das bedeutet, θ_{min} wird folgendermaßen zerlegt :

$$\theta_{min} = \theta_{LO} + \theta_{NLO} + \theta_{NNLO} + \dots \quad (3.37)$$

wobei θ_{LO} von der Ordnung $\mathcal{O}(p^2)$, θ_{NLO} von $\mathcal{O}(p^4)$ und θ_{NNLO} von $\mathcal{O}(p^6)$ ist. Im Minimum gilt :

$$\frac{\partial}{\partial \theta} V_{\chi} = 0 \quad (3.38)$$

In diese Gleichung wird nun θ_{min} eingesetzt, wobei in den Parametern θ_{NLO} und θ_{NNLO} entwickelt wird. Es muss in beiden Fällen nur bis zur ersten Ordnung entwickelt werden, da θ_{NLO} bereits von $\mathcal{O}(p^4)$ ist. Mit Hilfe dieser Überlegungen wird die Lösung der quartischen Gleichung auf die Lösung eines einfachen linearen Problems reduziert.

Das Ergebnis ist nun, dass θ_{NLO} identisch ist mit (3.22). Damit ist gezeigt, dass das bisherige Power-Counting-Schema auch hier anwendbar ist. Allerdings ist das Ergebnis für θ_{NNLO} um den Faktor zwanzig länger als das für θ_{NLO} , so dass es an dieser Stelle keinen Sinn macht, es zusätzlich aufzulisten.

3.3 Pion-Massen in der Nähe des Phasenübergangs

3.3.1 Ergebnisse in der Physical-Basis

Die Ergebnisse aus [15] stellen bis NLO die volle Lösung für die Orientierung des Vakuums und die Pion-Massen dar. Das Minimum des Potentials ist zwar die Lösung einer quartischen Gleichung, dennoch kann man auch hier für beliebiges η ein sinnvolles Approximationsschema definieren. An die Stelle einer Entwicklung in η oder χ tritt nun eine Entwicklung in den folgenden Größen :

$$\frac{\chi_0 X}{F_0^2} \ll 1 \quad \text{und} \quad \frac{\rho X}{F_0^2} \ll 1$$

Letztlich ist dies nichts anderes, als eine konsequente Fortsetzung des chiralen Power-Countings, denn Terme, in denen Produkte von mehr als einem der Niederenergie-Koeffizienten auftauchen, sind ja bereits von NNLO. Diese Überlegungen führen damit direkt zu den Ergebnissen in den Gleichungen (3.20) und (3.22).

Das Resultat für die Pion-Masse aus [15] kann auch wie folgt notiert werden :

$$\begin{aligned} m_\pi^2 = & \sqrt{\chi_0^2 + 2\chi_0\rho\cos(\omega) + \rho^2} + \frac{\chi_0^2 + 2\chi_0\rho\cos(\omega) + \rho^2}{32\pi^2 F_0^2} \ln\left(\frac{\sqrt{\chi_0^2 + 2\chi_0\rho\cos(\omega) + \rho^2}}{\Lambda^2}\right) \\ & + \frac{(16L_{86} - 8L_{54})(\chi_0^2 + 2\chi_0\rho\cos(\omega) + \rho^2)}{F_0^2} \\ & + \frac{(8L_{54} + 16W_{86} - 8W_{54} - 32L_{86})\cos(\omega)\chi_0\rho}{F_0^2} \\ & + \frac{(8L_{54} + 16W_{86} - 8W_{54} - 32L_{86} + (16L_{86} + 16W_{86} - 16W_{54})\cos^2\omega)\rho^2}{F_0^2} \\ & + \frac{((-32L_{86} + 32W_{86} - 32W_{54})\cos^3\omega + (32L_{86} - 32W_{86} + 32W_{54})\cos(\omega))\chi_0\rho^3}{(\chi_0^2 + 2\chi_0\rho\cos(\omega) + \rho^2)F_0^2} \\ & + \frac{((-16L_{86} + 16W_{86} - 16W_{54})\cos^2\omega + 16L_{86} + 16W_{86} - 16W_{54})\rho^4}{(\chi_0^2 + 2\chi_0\rho\cos(\omega) + \rho^2)F_0^2} \end{aligned} \tag{3.39}$$

In der Nähe des Phasenübergangs gilt wie schon erläutert :

$$1 + \eta \cos(\omega) \approx 0 \tag{3.40}$$

Für den Winkel ω genau auf dem Phasenübergang ergibt sich damit folgende Beziehung :

$$\omega = \arccos\left(-\frac{1}{\eta}\right) = \arccos\left(-\frac{\chi_0}{\rho}\right) \quad (3.41)$$

Nun gibt es zwei Möglichkeiten, die Phasenübergangslinie zu passieren. Zum einen kann man bei festem ω die Größe von η variieren, zum anderen kann man bei festem η den Winkel ω verändern.

Entscheidet man sich nun für die zweite Variante, so bedeutet dies :

$$\eta = \text{const} \quad \text{und} \quad 0 < v \equiv |\rho^2 - \chi_0^2| = \text{const} \quad (3.42)$$

sowie

$$\cos(\omega) = (t - 1) \frac{\chi_0}{\rho} \quad \text{mit} \quad t \rightarrow 0 \quad (3.43)$$

Eine Taylor-Entwicklung in $t \ll 1$ führt nun unter Vernachlässigung der Loop-Beiträge auf folgendes Ergebnis :

$$\begin{aligned} m_\pi^2 &= \sqrt{v} + \frac{(16W_{86} - 8W_{54})v}{F_0^2} + \left(\frac{(16W_{86} - 8L_{54} - 8W_{54})\chi_0^2}{F_0^2} + \frac{\chi_0^2}{\sqrt{v}} \right)t \\ &\quad + \left(\frac{(16L_{86} + 16W_{86} - 16W_{86})\chi_0^4}{F_0^2 v} - \frac{1}{2} \frac{\chi_0^4}{v^{\frac{3}{2}}} \right)t^2 \end{aligned} \quad (3.44)$$

Nun könnte man einwenden, dass die Terme, die inverse Potenzen von v enthalten, für $v \approx 0$ ein Problem darstellen. Das trifft aber nicht zu, da dieses Resultat per Konstruktion ja nur in der Asymptotik sehr kleiner t überhaupt definiert ist. In jedem Fall aber nimmt v einen festen, wenn auch durchaus sehr kleinen Wert an. Zu beobachten ist hier, dass für endliches v das Ergebnis auch direkt am Phasenübergang bei $t = 0$ endlich bleibt.

Diese Gleichung für die Pion-Masse ist aber auch für den umgekehrten Fall mit variablem η und festem t sinnvoll, solange nicht $\eta \approx 1$ wird. Denn dann würde $v \approx 0$ werden und das Ergebnis für die Pion-Massen könnte doch Singularitäten aufweisen. Zu betrachten ist also noch der Fall :

$$\chi_0 = \rho + \epsilon \quad (3.45)$$

und damit

$$\cos(\omega) = -\frac{\chi_0}{\rho} = -\left(1 + \frac{\epsilon}{\rho}\right) + t \quad (3.46)$$

Dies korrespondiert zu folgender Approximation :

$$\epsilon \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad 1 \gg t \equiv \text{const} > 0 \quad (3.47)$$

Das Ergebnis für die Pion-Masse ist nun :

$$\begin{aligned} m_\pi^2 &= \sqrt{2}(\rho^2)^{\frac{1}{2}}\sqrt{t} + \frac{(-8L_{54} + 8W_{86} + 8L_{86} - 8W_{54} + 8W_{86})t\rho^2}{F_0^2} \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}(\rho^2)^{\frac{1}{2}}\epsilon}{\rho\sqrt{t}} + \frac{(8L_{86} - 8W_{86} - 24W_{86} + 16W_{54})\rho\epsilon}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{(-8L_{54} + 8W_{86} + 8L_{86} - 8W_{54} + 8W_{86})t\rho\epsilon}{F_0^2} + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}(\rho^2)^{\frac{1}{2}}\sqrt{t}\epsilon}{\rho} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Ähnlich wie bereits für den ersten Fall geschildert, ist dieses Ergebnis für beliebig kleine Werte von t gültig, immer vorausgesetzt, dass $\epsilon \rightarrow 0$ geht. Auch hier bleibt auf der Phasenübergangslinie bei $\epsilon = 0$ ein endliches Resultat für die Pion-Masse übrig.

3.3.2 Ergebnisse in der Twisted-Basis

Im letzten Abschnitt wird deutlich, dass es nicht ganz einfach ist, in der Physical-Basis zu erkennen, was in der Nähe des Phasenübergangs tatsächlich geschieht. Die gesamte Diskussion lässt sich aber durch eine Transformation der Ergebnisse für die Pion-Massen in die Twisted-Basis erheblich vereinfachen. Entscheidend ist hier die korrekte Transformation des Drehwinkels ω zu ω_0 . Diese beiden Winkel sind verknüpft über folgende Relationen :

$$\cos \omega_0 = \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} = \frac{\chi_0 \cos \omega + \rho}{|\chi^*|} \quad (3.49)$$

$$\cos \omega = \frac{|\chi^*| \cos \omega_0 - \rho}{\chi_0} \quad (3.50)$$

Damit lässt sich nun das volle NLO-Ergebnis für die Pion-Masse in die Twisted-Basis transformieren. Um eine kompaktere Notation zu ermöglichen, wurden in Anlehnung an [27] folgende Abkürzungen eingeführt.

$$W = W_{86} - 2L_{86}, \quad \tilde{W} = W_{54} - L_{54}, \quad W' = W'_{86} - W_{86} + L_{86} \quad (3.51)$$

Hierbei ist immer die im Vergleich zu [27] um den Faktor $\frac{1}{2}$ abweichende Definition der Niederenergie-Koeffizienten zu beachten.

$$\begin{aligned} m_\pi^2 &= |\chi^*|^2 + \frac{|\chi^*|^2}{32\pi^2 F_0^2} \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} + \frac{(16L_{86} - 8L_{54}) |\chi^*|^2}{F_0^2} \\ &+ \frac{(16W - 8\tilde{W}) \cos(\omega_0) |\chi^*| \rho}{F_0^2} + 16 \frac{W' \cos^2(\omega_0) |\chi^*|^2 \rho^2}{F_0^2 \chi_0^2} \\ &+ \left(32 \frac{W' \cos(\omega_0)}{|\chi^*| F_0^2} + \frac{(-32W' \cos^3(\omega_0) - 32W' \cos(\omega_0)) |\chi^*|}{F_0^2 \chi_0^2} \right) \rho^3 \quad (3.52) \\ &+ \left(-16 \frac{W'}{F_0^2 |\chi^*|^2} + \frac{80W' \cos^2(\omega_0) + 16W'}{F_0^2 \chi_0^2} \right) \rho^4 \\ &- 64 \frac{W' \cos(\omega_0) \rho^5}{|\chi^*| F_0^2 \chi_0^2} + 16 \frac{W' \rho^6}{F_0^2 \chi_0^2 |\chi^*|^2} \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis entspricht nach Entwicklung in ρ dem bis $\mathcal{O}(\rho^2)$ angegebenen Resultat in [27]. Der Phasenübergang tritt bei $\chi'_0 = 0$ auf beziehungsweise für $\cos \omega_0 = 0$. An dieser Stelle erfährt der Winkel ω_0 einen Sprung der Größe π und $\cos \omega_0$ wechselt das Vorzeichen. Solange die Twist-Masse von Null verschieden ist, weist dieses Ergebnis keine Singularitäten auf, da in diesem Fall in der Nähe des Übergangs immer $|\chi^*| \approx |\chi'_0| > 0$ gilt. Auf der Wilson-Achse selbst, das heißt im Fall verschwindender Twist-Masse, gibt es Singularitäten der Ordnung $\mathcal{O}(\rho^3)$. Der Term $\cos \omega_0$ nimmt in diesem Fall den Wert $+1$ im Bereich rechts des Phasenübergangs an und den Wert -1 im Bereich links der Phasenübergangslinie.

3.4 Messgrößen der Simulation in $tm\chi PT$

Mit Hilfe der Relationen aus dem ersten Abschnitt lassen sich nun die Gleichungen für die Pion-Massen und die Pion-Zerfallskonstante so umformulieren, dass sie direkt mit den Ergebnissen der numerischen Simulation verglichen werden können. Um möglichst sichere Ergebnisse bei der Analyse der Daten zu erhalten, ist wichtig, vor allem tatsächlich „gemessene“ Parameter zu betrachten. Damit sind Größen gemeint, die in den Rechnungen als „Observable“ zugänglich sind. Aus diesem Grund werden alle wichtigen Größen nicht nur als Funktion der einfachen nicht renormierten Quark-Massen, sondern auch als Funktion der PCAC-Quark-Masse ausgedrückt.

In [27] wurden neben den Pion-Massen sowie der Pion-Zerfallskonstante auch die Ergebnisse für das pseudoskalare Matrixelement $f_P \hat{=} g_\pi$ und den Drehwinkel-Faktor $c \equiv \cos \omega_m$ aus Gleichung (3.61) direkt in der Twisted-Basis angegeben. Für die folgenden Rechnungen erweist es sich als vorteilhaft, diese Ergebnisse anstelle unserer zu verwenden, da hiermit außerdem die Basis-Transformation entfällt. Abschließend wird die Äquivalenz der Ergebnisse in beiden Darstellungen noch einmal explizit gezeigt.

Da die Notation in [27] in vielen Punkten von der hier verwendeten abweicht, hier eine kurze Übersicht der für die Rechnungen benötigten Relationen :

hier	$2B_0\tilde{m}$	\tilde{m}	μ	$2B_0\mu$	χ_0	ρ	m'_0	χ'
SW [27]	\hat{m}	m	$-\mu$	$-\hat{\mu}$	$\sqrt{\hat{m}^2 + \hat{\mu}^2}$	\hat{a}	m'	χ'
hier	$ \chi^* $	m_q	F_0	$f_\pi \equiv F_\pi$	g_π	L_{ji}, W_{ji}, W'_{ji}	c	ω'
SW [27]	M'	m_q	f	f_A	f_P	$2L_{ij}, 2W_{ij}, 2W'_{ij}$	$\cos \omega_m$	ω_0

3.4.1 Drehwinkel in der Twisted-Basis

$$c_0 \equiv \cos \omega_0 = \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} = \frac{\chi_0 \cos \omega + \rho}{|\chi^*|} \quad (3.53)$$

$$s_0 \equiv \sin \omega_0 = \frac{\chi'_3}{|\chi^*|} = \frac{\chi_0 \sin \omega}{|\chi^*|} \quad (3.54)$$

Der Winkel ω_0 ist definiert durch :

$$\langle 0|U|0 \rangle_{LO} \equiv U_0 = \frac{\hat{m} + \hat{a} + i\hat{\mu}\tau_3}{|\chi^*|} = \frac{\chi'_0 + i\chi'_3\tau_3}{|\chi^*|} \equiv \exp(i\omega_0\tau_3) \quad (3.55)$$

Wie schon gezeigt, kann man hier ohne Einschränkung $\chi_0 > 0$ annehmen, da sich durch Redefinition von ω ein negatives Vorzeichen von χ_0 immer eliminieren lässt. Der Rotationswinkel ω_0 des Vakuums korrespondiert zum Minimum des \mathcal{L}_2 -Potentials (LO) als Funktion der Pion-Felder, allerdings ist zu beachten, dass diese nicht identisch sind, da unterschiedliche Basis-Darstellungen verwendet werden. In nächst-führender Ordnung gilt für die Ausrichtung ω_m des Vakuums :

$$\langle 0|U|0 \rangle_{NLO} \equiv U_m \equiv \exp(i\omega_m\tau_3) = \exp(i[\omega_0 + \epsilon]\tau_3) \quad (3.56)$$

in [27] wird der Wert von ϵ angegeben :

$$\epsilon = -\frac{16}{f^2} \hat{a} s_0 \left(W + 2W' \frac{\hat{a} c_0}{M'} \right) \quad (3.57)$$

Folgende Übersetzungsregeln sind hierbei zu beachten :

$$W = \frac{1}{2} (W_{86} - 2L_{86}), \quad \tilde{W} = \frac{1}{2} (W_{54} - L_{54}), \quad W' = \frac{1}{2} (W'_{86} - W_{86} + L_{86}) \quad (3.58)$$

Der Faktor $\frac{1}{2}$ resultiert aus der um den Faktor 2 abweichenden Definition der Niederenergie-Koeffizienten in [27]. Damit ergibt sich ϵ zu :

$$\epsilon = -\frac{8}{F_0^2} \rho s_0 (W_{86} - 2L_{86}) - \frac{16}{F_0^2} \rho^2 \frac{s_0 c_0}{|\chi^*|} (W'_{86} - W_{86} + L_{86}) \quad (3.59)$$

Außerdem gilt :

$$\cos \epsilon = 1 + NNLO, \quad \sin \epsilon = \epsilon + NNLO \quad (3.60)$$

da Terme, die Produkte der Niederenergie-Koeffizienten enthalten, bereits von next-to-next-to-leading order sind. Damit lässt sich nun der Faktor c angeben :

$$c = \cos \omega_m = \cos \omega_0 \cos \epsilon - \sin \omega_m \sin \epsilon = \cos \omega_0 - \epsilon \sin \omega_0 \quad (3.61)$$

und nach Einsetzen :

$$c = c_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho s_0^2 (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{16}{F_0^2} \rho^2 \frac{s_0^2 c_0}{|\chi^*|} (W'_{86} - W_{86} + L_{86}) \quad (3.62)$$

beziehungsweise :

$$c = \frac{1}{|\chi^*|} \left\{ \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho \frac{\chi'^2_3}{|\chi^*|} (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{16}{F_0^2} \rho^2 \frac{\chi'_0 \chi'^2_3}{|\chi^*|^2} (W'_{86} - W_{86} + L_{86}) \right\} \quad (3.63)$$

3.4.2 Pion-Massen in der Twisted-Basis

Das Ergebnis für die Pion-Masse in [27] lautet :

$$\begin{aligned} m_{\pi^\pm}^2 &= M' + \frac{16}{f^2} \left\{ M'^2 (2L_{68} - L_{45}) + M' \hat{a} c \left(2W - \tilde{W} \right) + 2\hat{a}^2 c^2 W' \right\} + 1-loop \\ &= |\chi^*| + \frac{8}{F_0^2} |\chi^*|^2 (2L_{86} - L_{54}) + \frac{8}{F_0^2} |\chi^*| \rho c_0 (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \\ &\quad + \frac{16}{F_0^2} \rho^2 c_0^2 (W'_{86} - W_{86} + L_{86}) + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} |\chi^*|^2 \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} \end{aligned} \quad (3.64)$$

Hier wurde c durch c_0 ersetzt, da ja $c = c_0 + NLO$ ist und c nur in Termen auftritt, die selbst schon von NLO sind.

$$m_{\pi^\pm}^2 = |\chi^*| + \frac{8}{F_0^2} |\chi^*|^2 (2L_{86} - L_{54}) + \frac{8}{F_0^2} \rho \chi'_0 (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54})$$

$$+ \frac{16}{F_0^2} \rho^2 \frac{\chi_0'^2}{|\chi^*|^2} (W'_{86} - W_{86} + L_{86}) + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} |\chi^*|^2 \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} \quad (3.65)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit unserem in der Physical-Basis ausgedrückten Resultat für die Pion-Massen überein, wie sich nach Einsetzen von :

$$|\chi^*| = \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \mathcal{O}(\rho^3), \quad |\chi^*|^2 = \chi_0^2 + 2\chi_0\rho_0 + \rho^2, \quad \chi'_0 = \chi_0 \cos \omega + \rho \quad (3.66)$$

zeigt, wobei in unseren Rechnungen $\chi \gg \rho$ also auch $\chi_0 \gg \rho_0, \rho_3$ vorausgesetzt wurde, so dass unter der Voraussetzung $\chi_0 > 0$ in den obigen Gleichungen $|\chi^*| > 0$ auch tatsächlich immer erfüllt ist :

$$\begin{aligned} m_{\pi^\pm}^2 &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{8}{F_0^2} (\chi_0^2 + 2\chi_0\rho_0 + \rho^2) (2L_{86} - L_{54}) \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} \rho (\chi_0 \cos \omega + \rho) (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \\ &\quad + \frac{16}{F_0^2} \rho^2 \cos^2 \omega (W'_{86} - W_{86} + L_{86}) \\ &\quad + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} (\chi_0^2 + 2\chi_0\rho_0 + \rho^2) \ln \frac{\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0}}{\Lambda^2} \end{aligned} \quad (3.67)$$

beziehungsweise mit $\rho_0 = \rho \cos \omega$, $\rho_3 = \rho \sin \omega$ und $\rho^2 = \rho_0^2 + \rho_3^2$:

$$\begin{aligned} m_{\pi^\pm}^2 &= \chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0} + \frac{8}{F_0^2} \chi_0^2 (2L_{86} - L_{54}) + \frac{8}{F_0^2} \chi_0 \rho_0 (2W_{86} - W_{54} - L_{54}) \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} \rho_0^2 (2W'_{86} - W_{54}) + \frac{8}{F_0^2} \rho_3^2 (2W_{86} - W_{54} - 2L_{86}) \\ &\quad + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} (\chi_0^2 + 2\chi_0\rho_0 + \rho^2) \ln \frac{\chi_0 + \rho_0 + \frac{\rho_3^2}{2\chi_0}}{\Lambda^2} \end{aligned} \quad (3.68)$$

3.4.3 Pion-Zerfallskonstante in der Twisted-Basis

Für die Pion-Zerfallskonstante sind in [27] folgende Ergebnisse aufgeführt :

$$\frac{f_A}{f} = 1 + \frac{4}{f^2} (2M'L_{45} + \hat{a}c 2\tilde{W}) + 1-loop \quad (3.69)$$

$$\frac{f_P}{fB_0} = 1 + \frac{8}{f^2} [M'(4L_{68} - L_{45}) + \hat{a}c (2W - \tilde{W})] + 1-loop \quad (3.70)$$

wobei hier wieder die um den Faktor 2 abweichende Definition der Niederenergie-Koeffizienten zu beachten ist. Damit folgt damit nach Berechnung der Loop-Beiträge :

$$\begin{aligned} \frac{f_\pi}{F_0} &= 1 + \frac{4}{F_0^2} \left\{ |\chi^*| L_{54} + \rho \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} (W_{54} - L_{54}) \right\} - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} |\chi^*| \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} \quad (3.71) \\ \frac{g_\pi}{F_0 B_0} &= 1 + \frac{4}{F_0^2} \left\{ |\chi^*| (4L_{86} - L_{54}) + \rho \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \right\} \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{32\pi^2 F_0^2} |\chi^*| \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} \quad (3.72)$$

3.4.4 PCAC-Quark-Masse

In nächst-führender Ordnung lautet die PCAC-Quark-Masse :

$$m^{PCAC} = \frac{F_\pi m_{\pi^\pm}^2}{2 F_P} \quad (3.73)$$

beziehungsweise unter Berücksichtigung des Drehwinkels :

$$m_\chi^{PCAC} = \frac{c F_\pi m_{\pi^\pm}^2}{2 F_P} \quad (3.74)$$

so dass mit den obigen Ergebnissen sofort folgt :

$$\begin{aligned} \chi_{PCAC} &\equiv 2B_0 m^{PCAC} = \frac{\left(\frac{F_\pi}{F_0}\right) m_{\pi^\pm}^2}{\left(\frac{F_P}{F_0 B_0}\right)} \\ &= |\chi^*| + \frac{8}{F_0^2} \rho_0 |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho_3^2 \end{aligned} \quad (3.75)$$

sowie :

$$\begin{aligned} \chi'_{PCAC} &\equiv c \chi_{PCAC} = 2B_0 m_\chi^{PCAC} = \frac{c \left(\frac{F_\pi}{F_0}\right) m_{\pi^\pm}^2}{\left(\frac{F_P}{F_0 B_0}\right)} \\ &= \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho_3^2 \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} \end{aligned} \quad (3.76)$$

Weiterhin wird folgende Abkürzung verwendet :

$$\bar{\chi} = \sqrt{\chi'^2_{PCAC} + \chi'^2_3} = 2B_0 \sqrt{m_\chi^{PCAC}^2 + \mu^2} \quad (3.77)$$

Der Zusammenhang mit $|\chi^*|$ ist bis $\mathcal{O}(a^2)$:

$$\begin{aligned} \bar{\chi}^2 &= \chi'^2_{PCAC} + \chi'^2_3 \\ &= |\chi^*|^2 + \frac{8}{F_0^2} 2\rho \chi'_0 |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{32}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \frac{\chi'^2_0}{|\chi^*|} \\ &\quad + \frac{16}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho_3^2 \frac{\chi'^2_0}{|\chi^*|} \end{aligned} \quad (3.78)$$

also folgt :

$$\begin{aligned}\bar{\chi} &= |\chi^*| + \frac{8}{F_0^2} \rho \chi'_0 (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \frac{\chi'^2_0}{|\chi^*|^2} \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho_3^2 \frac{\chi'^2_0}{|\chi^*|^2}\end{aligned}\quad (3.79)$$

und damit ergibt sich :

$$\begin{aligned}|\chi^*| &= \bar{\chi} - \frac{8}{F_0^2} \rho \chi'_0 (W_{86} - 2L_{86}) - \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \frac{\chi'^2_0}{\bar{\chi}^2} \\ &\quad - \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho_3^2 \frac{\chi'^2_0}{\bar{\chi}^2}\end{aligned}\quad (3.80)$$

da ja $\bar{\chi} = |\chi^*| + \mathcal{O}(a)$ gilt. Unter Ausnutzung der Relation :

$$\chi'_{PCAC} = \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86}) + \mathcal{O}(a^2) = \chi'_0 + NLO \quad (3.81)$$

folgt damit der gesuchte Ausdruck :

$$\begin{aligned}|\chi^*| &= \bar{\chi} - \frac{8}{F_0^2} \rho \chi'_{PCAC} (W_{86} - 2L_{86}) - \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \frac{\chi'^2_{PCAC}}{\bar{\chi}^2} \\ &\quad - \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho_3^2 \frac{\chi'^2_{PCAC}}{\bar{\chi}^2}\end{aligned}\quad (3.82)$$

da Terme der Form X_{ji}^2 bereits von NNLO sind. Außerdem gilt für den Drehwinkel ω_0 :

$$\cos \omega_0 = \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} = \frac{\chi'_{PCAC}}{\bar{\chi}} - \frac{8}{F_0^2} \rho (1 - \chi'^2_{PCAC}) (W_{86} - 2L_{86}) + \mathcal{O}(a^2) \quad (3.83)$$

3.4.5 Pion-Massen als Funktion von χ'_{PCAC}

Für $\chi'_0 > 0$ und $\chi'_0 < 0$ gilt bei $\eta = \frac{\rho}{\chi} \ll 1$ für die Massen der geladenen Pionen jeweils :

$$\begin{aligned}m_{\pi^\pm}^2 &= |\chi^*| + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} |\chi^*|^2 \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) |\chi^*|^2 \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) |\chi^*| \rho_0 + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho_3^2\end{aligned}\quad (3.84)$$

beziehungsweise ausgedrückt durch $\bar{\chi}$ und χ'_{PCAC} :

$$\begin{aligned}m_{\pi^\pm}^2 &= \bar{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi}^2 \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \bar{\chi}^2 \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \chi'_{PCAC} \rho\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho_0^2 \sin^2(\omega_0) \\ & + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 4L_{86} + 2W_{86}) \rho_3^2 \sin^2(\omega_0) \end{aligned} \quad (3.85)$$

und nach Eliminieren des Winkels ω_0 zugunsten von χ'_{PCAC} mit $\cos \omega_0 = \frac{\chi'_{PCAC}}{\bar{\chi}} + \mathcal{O}(a)$:

$$\begin{aligned} m_{\pi^\pm}^2 &= \bar{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi}^2 \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \bar{\chi}^2 \\ & + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \chi'_{PCAC} \rho \\ & + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho^2 \frac{\chi'^2_{PCAC}}{\bar{\chi}^2} \left(1 - \frac{\chi'^2_{PCAC}}{\bar{\chi}^2}\right) \\ & + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 4L_{86} + 2W_{86}) \rho^2 \left(1 - \frac{\chi'^2_{PCAC}}{\bar{\chi}^2}\right)^2 \end{aligned} \quad (3.86)$$

3.4.6 Pion-Zerfallskonstanten als Funktion von χ'_{PCAC} bis $\mathcal{O}(a)$

In den beiden Phasen $\chi'_0 > 0$ und $\chi'_0 < 0$ gilt für die Pion-Zerfallskonstante [13] :

$$\frac{f_\pi}{F_0} = 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} |\chi^*| \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \{L_{54} |\chi^*| + (-L_{54} + W_{54}) \rho_0\} \quad (3.87)$$

$$\begin{aligned} \frac{g_\pi}{F_0 B_0} &= 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} |\chi^*| \ln \frac{|\chi^*|}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) |\chi^*| \\ & + \frac{4}{F_0^2} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \rho_0 \end{aligned} \quad (3.88)$$

oder als Funktion von $\bar{\chi}$ und χ'_{PCAC} :

$$\frac{f_\pi}{F_0} = 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \{L_{54} \bar{\chi} + (-L_{54} + W_{54}) \rho_0\} \quad (3.89)$$

$$= 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \left\{ L_{54} \bar{\chi} + (-L_{54} + W_{54}) \rho \frac{\chi'_{PCAC}}{\bar{\chi}} \right\} \quad (3.90)$$

$$\begin{aligned} \frac{g_\pi}{F_0 B_0} &= 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) \bar{\chi} \\ & + \frac{4}{F_0^2} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \rho_0 \end{aligned} \quad (3.91)$$

$$\begin{aligned} & = 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) \bar{\chi} \\ & + \frac{4}{F_0^2} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \rho \frac{\chi'_{PCAC}}{\bar{\chi}} \end{aligned} \quad (3.92)$$

Um Verwechslungen auszuschließen, wird g_π im folgenden als *pseudoskalares Matrixelement* bezeichnet.

3.5 Analyse der Simulationsergebnisse

Da die numerischen Simulationen noch immer sehr viel Rechenzeit benötigen, steht bislang nur eine sehr kleine Zahl an Datenpunkten zur Verfügung. Aus diesem Grund ist natürlich auch die Anzahl der Modellparameter in der Regressionsanalyse der Daten stark eingeschränkt. Als Konsequenz daraus macht es an dieser Stelle nur Sinn, die Gleichungen der $\text{tm}\chi\text{PT}$ bis zur Ordnung $\mathcal{O}(a)$ zu betrachten.

3.5.1 χ^2 -Fit Probleme

Als gut etablierte Standardmethode wird der χ^2 -Fit seit langem erfolgreich zur Analyse von Messdaten verwendet. Der sogenannte „maximum likelihood estimator“ ist in diesem Fall für N Datenpunkte und k Modellparameter :

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - f(x_i; \alpha_1, \dots, \alpha_k)}{\sigma_i} \right)^2 \quad (3.93)$$

Vorausgesetzt wird zunächst, dass ein expliziter funktionaler Zusammenhang zwischen den Größen x_i und den Messwerten y_i besteht. Also ein Modell der Form :

$$y_i = f(x_i; \alpha_1, \dots, \alpha_k) \quad (3.94)$$

Ist f nun eine nichtlineare Funktion der Fit-Parameter, so spricht man von „nichtlinearer Regression“. Die entscheidende Einschränkung im Fall des χ^2 -Fits ist allerdings die Annahme, dass die x_i exakt bekannt sind. Ist das nicht mehr der Fall, lässt sich dies approximativ jedoch mit der Methode der „effektiven Varianzen“ berücksichtigen. Dazu wird im Nenner von Gleichung (3.93) σ_i gemäß der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung erweitert zu :

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - f(x_i; \alpha, \dots, \alpha_k)}{\sqrt{\sigma_{y,i}^2 + \left(\frac{\partial f(x_i; \alpha_1, \dots, \alpha_k)}{\partial x_i} \sigma_{x,i} \right)^2}} \right)^2 \quad (3.95)$$

Allerdings ist diese Erweiterung alles andere als unproblematisch. Zum einen ist diese Vorgehensweise theoretisch kaum begründet, andererseits konvergiert diese Methode in der Regel nicht gegen die wahre Least-Squares-Lösung [29, 30].

Damit ist dieses Verfahren ungeeignet für die Auswertung dieser Simulationsergebnisse, da bislang nur eine sehr kleine Anzahl von Datenpunkten zur Verfügung steht. Außerdem sind die Fehler der x_i in diesem Fall von der selben Größenordnung, wie die der y_i , so dass die Approximation der effektiven Varianzen hier kaum noch gerechtfertigt ist.

3.5.2 Generalized-Least-Squares

Um zu wirklich statistisch korrekten Schätzwerten für die Fit-Parameter zu kommen, eignet sich das sogenannte *Generalisierte-Least-Squares* (GNLS) Verfahren sehr viel besser als der herkömmliche χ^2 -Fit. Eine Einführung lässt sich beispielsweise in [31, 32] finden.

Es wird nun der Fall betrachtet, dass der Datensatz aus N Punkten und Q gemessenen Größen besteht. Im Gegensatz zu den meisten herkömmlichen Fit-Methoden lassen sich mit den GNLS mehr als zwei Größen gleichzeitig korrelieren. Ein Beispiel wäre hier $[m_{PCAC}, m_\pi^2, F_\pi]$, das bedeutet $Q = 3$. Als Modell werden M Fit-Funktionen verwendet, die gleichzeitig zu berücksichtigen sind.

Die grundlegende Fragestellung bei der Regressionsanalyse ist nun nicht etwa : „Wie wahrscheinlich ist es, dass ausgehend von den gemessenen Werten, ein bestimmter Satz Modellparameter α_k korrekt ist?“. Sondern es wird umgekehrt gefragt : „Wie wahrscheinlich ist es, ausgehend von den Werten α_k für die Fit-Parameter, die gemessenen Werte zu erhalten?“ Gesucht wird also nach den „wahren“ Werten der Variablen $\bar{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)^T$. Die \mathbf{x}_i sind hierbei Q -dimensionale Spaltenvektoren, die im obigen Beispiel die Komponenten $[m_{PCAC}^i, m_\pi^{2i}, F_\pi^i]$ besitzen. Die tatsächlich gemessenen Werte werden mit $\bar{\mathbf{x}}^0 = (\mathbf{x}_1^0, \dots, \mathbf{x}_N^0)^T$ bezeichnet, wobei die \mathbf{x}_i^0 wiederum Q -dimensionale Vektoren sind. Im Folgenden werden $\bar{\mathbf{x}}^0$ und $\bar{\mathbf{x}}$ als NQ -dimensionale Spaltenvektoren aufgefasst.

Unter der Voraussetzung der Normalverteilung der $\mathbf{x}_i = \{x_{i,j}\}_{j=1\dots Q}$ und bekannter diagonaler Kovarianz-Matrix $\bar{\sigma} = \text{diag}(\sigma_{i,j}^2)_{i=1\dots N}^{j=1\dots Q}$, ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Komponente j der i -ten Messung :

$$L_{i,j} = \frac{1}{\sigma_{i,j}\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x_{i,j} - x_{i,j}^0)^2}{2\sigma_{i,j}^2}\right] \quad (3.96)$$

Die Wahrscheinlichkeit für den gesamten Datensatz ist dann gegeben durch das Produkt über alle i, j :

$$L = \prod_{i,j} L_{i,j} \quad (3.97)$$

Für den Fall, dass Korrelationen zwischen den einzelnen Elementen bestehen, besitzt die Kovarianz-Matrix $\bar{\sigma}$ auch von Null verschiedene Nichtdiagonalelemente, so dass die Wahrscheinlichkeit für den NQ -dimensionalen Vektor $\bar{\mathbf{x}}^0$ als multivariate Normalverteilung geschrieben werden kann :

$$L = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{NQ}{2}}} \frac{1}{\sqrt{\det \bar{\sigma}}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0)\right] \quad (3.98)$$

beziehungsweise :

$$\ln L = -\frac{NQ}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln(\det \bar{\sigma}) - \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0) \quad (3.99)$$

Es ist sofort klar, dass die Wahrscheinlichkeit genau dann ihr Maximum annimmt, wenn der Term

$$\frac{1}{2} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0)$$

minimal ist. Die triviale Lösung $\bar{\mathbf{x}}^0 = \bar{\mathbf{x}}$ ist nicht von Interesse, sondern nur die Lösung $\bar{\mathbf{x}}$, die gleichzeitig auch die M Fit-Funktionen erfüllt. Diese lassen sich in folgender Form notieren :

$$\bar{\mathbf{G}}(\bar{\mathbf{x}}, \alpha_1, \dots, \alpha_k) = \bar{\mathbf{0}} \quad (3.100)$$

$\bar{\mathbf{G}}$ ist damit ein MN -dimensionaler Vektor. Mit Hilfe der Methode der Lagrangemultiplikatoren lässt sich dieses Minimierungsproblem unter der Nebenbedingung $\bar{\mathbf{G}} = \bar{\mathbf{0}}$ auch so formulieren :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0) + \bar{\mu} \bar{\mathbf{G}} \quad (3.101)$$

Hierbei ist $\bar{\mu}$ der MN -dimensionalen Zeilenvektor der Langrangemultiplikatoren.

3.5.3 Abschätzung der Unsicherheiten der Fit-Parameter

Die Unsicherheiten, mit denen die Schätzwerte für die Fit-Parameter behaftet sind, wurden mit Hilfe einer Monte-Carlo Rechnung abgeschätzt. Hierzu werden ausgehend von den tatsächlichen Messdaten neue Sätze von Samples korrekter Statistik generiert. Für jeden dieser Monte-Carlo Datensätze wird nun ein eigener Fit durchgeführt, wobei die so berechnete Standardabweichung der Fit-Parameter ein Maß für ihre Unsicherheit ist. Da die Fehler der einzelnen Messpunkte hier in guter Näherung als normalverteilt angenommen werden können, lassen sich die Monte-Carlo Samples durch normalverteilte Zufallszahlen erzeugen. Der Mittelwert der Verteilung entspricht dabei jeweils dem tatsächlichen Messwert und die Standardabweichung dem entsprechenden Fehler.

3.5.4 χ^2 -Fit als Spezialfall des Generalized-Least-Squares-Fit

Die große Flexibilität des Generalized-Least-Squares-Fit zeigt sich auch in der Tatsache, dass der klassische χ^2 -Fit als ein Spezialfall hiervon betrachtet werden kann. In diesem Fall gibt es zwei Variablen x und y , die über einen funktionalen Zusammenhang der Form $f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_k) = y$ miteinander verknüpft sind. Dies bedeutet $M = 2$ Modellfunktionen und $Q = k$ Fit-Parameter. Im Fall von N Messwertepunkten y_i^0 lassen sich die y -Werte wieder in dem N -dimensionalen Vektor $\bar{\mathbf{y}}^0 = (y_1^0, \dots, y_N^0)$ zusammenfassen. Die unbekannten „wahren“ Werte sind $\bar{\mathbf{y}} = (y_1, \dots, y_N)$. Die für den χ^2 -Fit grundlegende Annahme, dass die x_i exakt bekannt sind bedeutet hier, dass diese bereits ihre „wahren“ Werte annehmen. Also $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}$ mit $\bar{\mathbf{x}} = (x_1, \dots, x_N)$ sowie $\bar{\mathbf{x}}^0 = (x_1^0, \dots, x_N^0)$ und damit folgt natürlich sofort :

$$\mathcal{L}_{\chi^2} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0) + \bar{\mu} \bar{\mathbf{G}} \quad (3.102)$$

Die Kovarianz-Matrix wird als diagonal vorausgesetzt also :

$$\bar{\sigma} = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_N^2) \quad (3.103)$$

Die Nebenbedingung $\bar{\mathbf{G}}$ folgt aus der Überlegung, dass die Werte x_i und y_i durch die Fit-Funktion

$$f(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i = 0 \quad (3.104)$$

miteinander verknüpft sind. Da dies für jeden der N Messpunkte erfüllt sein muss, ergibt sich in Vektor-Schreibweise einfach :

$$\bar{\mathbf{G}} = (f(x_1^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_1, \dots, f(x_N^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_N)^T \quad (3.105)$$

Die Minimierung von \mathcal{L}_{χ^2} ohne Nebenbedingungen aus Gleichung (3.116) ist nun aber äquivalent zur Minimierung von

$$\mathcal{L}'_{\chi^2} = \frac{1}{2} \left(\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}^0} \right) \bar{\sigma}^{-1} \left(\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}^0} \right)^T \quad (3.106)$$

mit den Bedingungen $f(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i = 0$. Explizites Ausführen der Summation im Skalarprodukt und Vernachlässigung des nun irrelevanten Faktors $\frac{1}{2}$ liefert :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}''_{\chi^2} &= \left(\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}^0} \right) \bar{\sigma}^{-1} \left(\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}^0} \right)^T = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - y_i^0)^2}{\sigma_i^2} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{(f(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i^0)^2}{\sigma_i^2} = \chi^2 \end{aligned} \quad (3.107)$$

womit die Äquivalenz des χ^2 -Fits zu dem skizzierten Spezialfall des Generalized-Least-Squares-Fit gezeigt ist.

Diese Betrachtung ist in zweierlei Hinsicht nützlich: Zum einen ist die obige Herleitung ein gutes Beispiel für die Anwendung des Generalized-Least-Squares-Fits, zum anderen ergibt sich hierdurch in der Praxis eine deutliche Vereinfachung der Arbeitsweise. Im Folgenden werden dort, wo es gerechtfertigt ist, auch weiterhin klassische χ^2 -Fits eingesetzt, für die im allgemeinen eine ganz andere numerische Implementierung nötig ist, als für einen Generalized-Least-Squares-Fit. Nun lassen sich aber für beide Verfahren die gleichen Algorithmen einsetzen, da anstelle von χ^2 auch genauso gut \mathcal{L}'_{χ^2} minimiert werden kann.

In der Praxis ergibt dadurch sich auch ein weiterer entscheidender Vorteil dieser neuen χ^2 -Methode : Die Minimierung von \mathcal{L}'_{χ^2} unter den Nebenbedingungen $f(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i = 0$ ist mit den hier verwendeten Algorithmen numerisch sehr viel effizienter als die direkte Minimierung von χ^2 . Der Vorteil liegt in einer um den Faktor 100 bis 1000 schnelleren Konvergenz der neuen χ^2 -Methode.

3.5.5 Simultaner χ^2 -Fit für mehrere Funktionen

Ausgehend von den Überlegungen des vorherigen Abschnitts lässt sich der χ^2 -Fit nun auch leicht auf den Fall mehrdimensionaler Datensätze und mehrerer Fit-Funktionen erweitern. Hierbei wird die Situation betrachtet, dass zwei oder mehr Funktionen

$$f^{(1)}(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) = y_i^{(1)}, \dots, f^{(M)}(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) = y_i^{(M)} \quad (3.108)$$

existieren, die einer als exakt bekannt angenommenen, Variablen x_i^0 mit

$$\bar{\mathbf{x}} \equiv \bar{\mathbf{x}^0} = (x_1^0, \dots, x_N^0) \quad (3.109)$$

mehrere Werte $y_i^{(m)}$, $m \in \{1, \dots, M\}$ zuordnen. Die Parameter α_k bilden einen gemeinsamen Satz von Fit-Parametern für alle M Fit-Funktionen. Dabei muss aber natürlich nicht jeder Parameter α_k auch tatsächlich in jeder Funktion $f^{(m)}$ vorkommen. Unter diesen Voraussetzungen liefert der Generalized-Least-Squares-Fit eine natürliche Erweiterung des χ^2 -Fits

auf mehrdimensionale Probleme. Gruppert man nun die „wahren“ $y_i^{(m)}$ und die gemessenen $y_i^{0(m)}$ in M-dimensionalen Spaltenvektoren

$$\mathbf{y}_i = (y_i^1, \dots, y_i^M)^T \quad (3.110)$$

sowie

$$\mathbf{y}^0_i = (y_i^{0(m)}, \dots, y_i^{0(M)})^T \quad (3.111)$$

so kann man dies noch einmal zusammenfassen zu MN -dimensionalen Spaltenvektoren :

$$\bar{\mathbf{y}} = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N)^T \quad (3.112)$$

und

$$\bar{\mathbf{y}}^0 = (\mathbf{y}^0_1, \dots, \mathbf{y}^0_N)^T \quad (3.113)$$

Analog lässt sich im Fall des MN -dimensionalen Vektors der Nebenbedingungen $\bar{\mathbf{G}}$ verfahren :

$$\mathbf{G}_i = (f^{(1)}(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i^{(1)}, \dots, f^{(M)}(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i^{(M)})^T \quad (3.114)$$

und

$$\bar{\mathbf{G}} = (\mathbf{G}_1, \dots, \mathbf{G}_N)^T \quad (3.115)$$

$\bar{\mu}$ ist hier wieder der MN -dimensionale Zeilenvektor der Lagrangemultiplikatoren und $\bar{\sigma} = \text{diag}(\sigma_{i,j}^2)_{i=1 \dots N}^{j=1 \dots M}$ die Kovarianz-Matrix unter der Annahme verschwindender Korrelationen. Minimiert wird wieder :

$$\mathcal{L}_{\chi^2} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0) + \bar{\mu} \bar{\mathbf{G}} \quad (3.116)$$

was äquivalent ist zur Minimierung von

$$\mathcal{L}'_{\chi^2} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0)^T \quad (3.117)$$

unter der Nebenbedingung $\bar{\mathbf{G}} = \bar{\mathbf{0}}$. Und nach Ausführen der Summationen :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}''_{\chi^2} &= (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0)^T \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^0)^T = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{(y_i^{(m)} - y_i^{0(m)})^2}{\sigma_{i,m}^2} \\ &= \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{(f^{(m)}(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i^{0(m)})^2}{\sigma_{i,m}^2} = \chi^2 \end{aligned} \quad (3.118)$$

Und konkret am Beispiel $M = 2$:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(f^{(1)}(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i^{0(1)})^2}{\sigma_{i,1}^2} + \sum_{i=1}^N \frac{(f^{(2)}(x_i^0; \alpha_1, \dots, \alpha_k) - y_i^{0(2)})^2}{\sigma_{i,2}^2} \quad (3.119)$$

3.5.6 Implementierung der Fit-Methoden

Nachdem in den vorherigen Abschnitten die verschiedenen Fit-Methoden allgemein beschrieben wurden, folgt nun ihre Implementierung im Fall der Auswertung der Monte-Carlo Simulationsergebnisse.

Zunächst ist es wichtig zu erwähnen, dass sämtliche unten aufgeführten Ergebnisse mit Hilfe numerischer Rechnungen in *Maple 9.5* durchgeführt wurden. Gegenüber einer eher „klassischen“ Implementierung der Algorithmen in *C++* oder *Fortran* ergeben sich bei dieser Vorgehensweise große Unterschiede.

Maple arbeitet mit sogenannten *Worksheets*, die nichts anderes sind als eine spezielle Skriptsprache. Im Vergleich zu kompilierten *C++* oder *Fortran* Programmen, folgt hieraus ein signifikanter Laufzeit-Overhead. Für große oder zeitkritische Anwendungen ist *Maple* also ungeeignet. Bei der Auswertung der hier vorliegenden Simulationsergebnisse ist dies jedoch akzeptabel, da nur wenige Fits für vergleichsweise wenige Datenpunkte durchgeführt werden.

Viel entscheidender sind jedoch die Vorteile einer Rechnung mit *Maple*. Durch das sofortige Feedback im interaktiven Modus gestaltet sich das Debugging, was bei der Programmierung typischerweise die meiste Zeit kostet, sehr viel einfacher als bei klassischen Programmiersprachen. Außerdem ermöglicht *Maple* eine Konzentration auf die wesentlichen Aspekte der Programmierung der Fit-Routinen, da wesentliche Kern-Algorithmen bereits in den mitgelieferten Bibliotheken zur Verfügung stehen. Der dadurch resultierende schlankere Code sorgt wiederum für eine deutliche Beschleunigung des Debuggings.

Gerade auch im Hinblick auf die erreichbare numerische Genauigkeit ist die Verwendung eines Computer-Algebra-Systems wie *Maple* für diese Rechnungen ausgesprochen vorteilhaft. Während in *Fortran* und *C* nur reelle Gleitkommazahlen mit 8- und compilerabhängig auch 16 Bit zur Verfügung stehen, unterliegt *Maple* in dieser Hinsicht keinerlei Beschränkungen. Die Präzision, mit der Gleitkommazahlen intern verarbeitet werden, lässt sich frei vorgeben. So ist es möglich, Rundungsfehler wie sie beispielsweise bei den Fits für $\mu = 0$ vorkommen können, drastisch zu minimieren. Rechnungen mit mehreren Hundert Nachkommastellen sind ohne Schwierigkeiten möglich, wobei natürlich auch die benötigte Rechenzeit deutlich ansteigt. Dies ist jedoch unproblematisch da, wie schon erwähnt, die Ausführungsgeschwindigkeit hier eine untergeordnete Rolle spielt.

Am besten lässt sich die Vorgehensweise im Fall des Generalized-Least-Squares-Fit an einem konkreten Beispiel verdeutlichen : Das Ziel ist ein simultaner Fit von $M = 2$ Funktionen $f^{(1)}(\bar{\mathbf{x}})$ und $f^{(2)}(\bar{\mathbf{x}})$, wobei es sich beispielsweise um die Pion-Masse und die Pion-Zerfallskonstante in Gitter-Einheiten handeln kann. Es liegen nun N Datenpunkte für $Q = 3$ gemessene Größen sowie deren Unsicherheiten vor :

$$x_{i,j}, \quad i \in \{1, \dots, N\} \text{ und } j \in \{1, \dots, Q\} \quad (3.120)$$

Die $x_{i,j}$ können auf folgende Weise zugeordnet werden :

$$x_{i,1} \equiv (a m_{PCAC})_i, \quad x_{i,2} \equiv (a F_\pi)_i, \quad x_{i,3} \equiv (a m_\pi)_i^2 \quad (3.121)$$

Für die tatsächlich gemessenen Werte gilt :

$$x_{i,1}^0 \equiv (a m_{PCAC})_i^0, \quad x_{i,2}^0 \equiv (a F_\pi)_i^0, \quad x_{i,3}^0 \equiv (a m_\pi)_i^{2^0} \quad (3.122)$$

Analog folgt für die Varianz der einzelnen Größen :

$$\sigma_{i,1} \equiv \Delta(a m_{PCAC})_i, \quad \sigma_{i,2} \equiv \Delta(a F_\pi)_i, \quad \sigma_{i,3} \equiv \Delta(a m_\pi)_i^2 \quad (3.123)$$

Und damit gilt :

$$\bar{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)^T \quad \text{mit} \quad \mathbf{x}_i = \{x_{i,j}\}_{j=1\dots Q} \quad (3.124)$$

$$\bar{\mathbf{x}}^0 = (\mathbf{x}_1^0, \dots, \mathbf{x}_N^0)^T \quad \text{mit} \quad \mathbf{x}_i^0 = \{x_{i,j}^0\}_{j=1\dots Q} \quad (3.125)$$

sowie

$$\bar{\sigma} = \text{diag}(\sigma_{i,j}^2)_{i=1\dots N}^{j=1\dots Q} \quad (3.126)$$

Als Nebenbedingung wird der Zusammenhang zwischen $a m_{PCAC}$, $a F_\pi$ und $a m_\pi$ verwendet :

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\bar{\mathbf{x}}) &\equiv a F_\pi (a m_\chi^{PCAC}) \\ &= a F_0 \left[1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \{L_{54} \bar{\chi} + (-L_{54} + W_{54}) \rho_0\} \right] \\ &\equiv b_5 - b_6 \bar{\chi}' \ln \frac{\bar{\chi}'}{\Lambda^2} + b_7 \frac{a m_\chi^{PCAC}}{\bar{\chi}'} + b_8 \bar{\chi}' \end{aligned} \quad (3.127)$$

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\bar{\mathbf{x}}) &\equiv a^2 m_\pi^2 (a m_\chi^{PCAC}) \\ &= a^2 \left[\bar{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi}^2 \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \bar{\chi}^2 \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \chi'_{PCAC} \rho \right] \\ &\equiv b_2 \bar{\chi}' + b_3 \bar{\chi}'^2 + b_4 a m_\chi^{PCAC} - \frac{a}{F_0} b_6 \bar{\chi}' \ln \frac{\bar{\chi}'}{\Lambda^2} \end{aligned} \quad (3.128)$$

mit

$$\bar{\chi} = \frac{1}{a} \sqrt{(a \chi_{PCAC})^2 + (a \chi'_3)^2} = 2B_0 \frac{1}{a} \sqrt{(a m_\chi^{PCAC})^2 + (Z a \mu)^2} \quad (3.129)$$

und

$$\bar{\chi}' = \sqrt{(a m_\chi^{PCAC})^2 + (Z a \mu)^2} \equiv \sqrt{(a m_\chi^{PCAC})^2 + b_1} \quad (3.130)$$

$\bar{\mathbf{G}}$ ist dann gegeben als :

$$\bar{\mathbf{G}} = (f^{(1)}(x_{i,1}) - x_{i,2}, f^{(2)}(x_{i,1}) - x_{i,3})^T \quad (3.131)$$

Zu minimieren ist nun die Größe :

$$\mathcal{L}' = (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0) \bar{\sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}^0)^T \quad (3.132)$$

unter der Nebenbedingung $\bar{\mathbf{G}} = \bar{\mathbf{0}}$.

Hierfür wurde die *Maple*-Routine *NLPSolve* verwendet, die allerdings auf hinreichend gute Startwerte für die freien Parameter angewiesen ist. In der Praxis zeigt sich, dass

$$\bar{\mathbf{x}}^{initial} = \bar{\mathbf{x}}^0 \quad (3.133)$$

eine brauchbare Wahl für den Startwert des Vektors der „wahren“ Größen ist. Da *NLPSolve* als Argument direkt den Vektor $\bar{\mathbf{G}} = \bar{\mathbf{0}}$ als Nebenbedingung akzeptiert, entfällt auch die explizite Verwendung der Lagrangemultiplikatoren $\bar{\mu}$. Die einfachste Möglichkeit erste Schätzwerte für die Fit-Parameter zu erhalten ist es, zunächst einen einfachen klassischen χ^2 -Fit durchzuführen. Dazu wird einfach der Ausdruck in Gl. (3.93) numerisch minimiert und das Ergebnis für die b_i als weiterer Startwert für *NLPSolve* verwendet.

Die Unsicherheiten der Fit-Parameter können nun mit Hilfe der in Abschnitt 3.5.3 beschriebenen Monte-Carlo Methode abgeschätzt werden. Es ergibt sich hierbei allerdings ein Problem, das im Zusammenhang mit Monte-Carlo Rechnungen immer wieder auftritt : Computergenerierte Zufallszahlen sind nur mit allergrößter Vorsicht zu verwenden. Wird doch ein Pseudozufallszahlengenerator verwendet, so sind einige Vorsichtsmaßnahmen nötig. Erstens ist es wichtig, nur solche Algorithmen zu verwenden, die die relevanten Tests auf größtmögliche statistische Unabhängigkeit bestanden haben. Zweitens ist es notwendig, die Ergebnisse bei Verwendung verschiedener Generatoren sowie echter Zufallszahlen zu vergleichen.

Ungünstigerweise zeigt sich, dass die in *Maple* zur Verfügung stehenden Pseudozufallszahlengeneratoren ungeeignet für die Monte-Carlo Simulation sind. Die einfachste Lösung für dieses Problem ist die Verwendung einer wirklich zufällig verteilten Bit-Folge, wie sie im Internet unter *random.org* zur Verfügung gestellt wird. Dort stehen handliche Pakete in der Größe von 10 MB zum freien Download bereit.

3.6 Fit-Ergebnisse

Ziel der Analyse der Monte-Carlo Simulation ist es, möglichst präzise Schätzwerte für die freien Parameter der Chiralen Störungstheorie zu erhalten. Es werden simultane Fits von Pion-Masse und Pion-Zerfallskonstante sowie der PCAC-Quark-Masse in Abhängigkeit des Hopping-Parameters κ durchgeführt. Es zeigt sich außerdem, dass sich Gitter-Effekte gegenseitig kompensieren, falls man die Masse und Zerfallskonstante als Funktionen der PCAC-Quark-Masse auffasst. Zur besseren Übersicht sind die für die Formulierung der Regressionsmodelle nötigen Relationen hier noch einmal aufgeführt.

Im folgenden werden die Ergebnisse im wesentlichen nach zunehmender Komplexität sowie sortiert nach ihrer Wichtigkeit präsentiert. Das Ziel dieser Art der Präsentation ist es, kleinschrittig den Weg zu den endgültigen Ergebnissen aufzuzeigen, da die gesamte Methodik der Fits zunächst noch entwickelt werden musste. In einem ersten Teil werden die Analysen zunächst noch mit Modellfunktionen durchgeführt, die zwar vergleichsweise gut zu handhaben sind, aber noch ein hohes Maß an Redundanz besitzen. Anschließen werden in den abschließenden Fits nur noch die physikalischen Modellfunktionen direkt aus der Chiralen Störungstheorie verwendet, die keinerlei redundante Parameter mehr enthalten und damit verlässliche Vorhersagen über die Niederenergiekonstanten ermöglichen.

3.6.1 Renormierung auf dem Gitter

Eine wesentliche Komplikation, die einen direkten Vergleich der Resultate der Chiralen Störungstheorie mit numerischen Gitter-Simulationen erschwert, ist die Existenz einer Vielzahl unterschiedlicher relativer Renormierungsfaktoren. Diese Faktoren sind im wesentlichen das Resultat der expliziten Brechung der chiralen Symmetrie auf einem diskreten Raum-Zeit Gitter.

Alle Parameter der Chiralen Störungstheorie werden, ohne dies immer explizit aufzuführen, als renormierte Größen betrachtet. Um nun den Vergleich mit Daten der Gitter-Rechnungen zu ermöglichen, ist es notwendig, diese Größen von den nicht renormierten Größen auf dem Gitter zu unterscheiden. Eine sinnvolle Konvention, die auch die Notation nicht unnötig verkompliziert, ist es, die Gitter-Größen durch den Index „*lattice*“ zu kennzeichnen.

Da es sich bei der Pion-Masse um eine On-Shell Größe handelt, sind die Simulationsergebnisse für $m_{\pi^\pm}^2$ bereits als renormiert zu betrachten und damit direkt mit der Chiralen Störungstheorie vergleichbar.

Zunächst ist es wichtig, $\bar{\chi}$ durch die korrekten Gitter-Größen auszudrücken :

$$\begin{aligned}
 \bar{\chi} &= \frac{1}{a} \sqrt{(a \chi'_{PCAC})^2 + (a \chi'_3)^2} = 2B_0 \frac{1}{a} \sqrt{(a m_\chi^{PCAC})^2 + (a \mu)^2} \\
 &= 2B_0 \frac{1}{a} \sqrt{\left(\frac{Z_A}{Z_P} a m_{\chi,lattice}^{PCAC}\right)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_P}\right)^2} \\
 &= 2B_0 \frac{Z_A}{Z_P} \frac{1}{a} \sqrt{\left(a m_{\chi,lattice}^{PCAC}\right)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \\
 &\equiv 2B \frac{1}{a} \sqrt{\left(a m_{\chi,lattice}^{PCAC}\right)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2}
 \end{aligned} \tag{3.134}$$

Gitter-Größen	renormierte Größen
$m_{\chi,lattice}^{PCAC}$	$m_{\chi}^{PCAC} = \frac{Z_A}{Z_P} m_{\chi,lattice}^{PCAC}$
$\mu_{lattice}$	$\mu = \frac{1}{Z_P} \mu_{lattice}$
$f_{\pi,lattice} \equiv f_{\pi}^{(V_c)}$	$f_{\pi} = f_{\pi,lattice}$
$g_{\pi,lattice}$	$g_{\pi} = Z_P g_{\pi,lattice}$

Tabelle 3.1: Renormierungsfaktoren

Folgende Abkürzungen werden außerdem benutzt :

$$B \equiv B_0 \frac{Z_A}{Z_P} \quad (3.135)$$

$$Z' \equiv \frac{2B}{a} = \frac{2B_0}{a} \frac{Z_A}{Z_P} \quad (3.136)$$

$$\overline{\chi}' \equiv \sqrt{\left(a m_{\chi,lattice}^{PCAC}\right)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \quad (3.137)$$

$$\overline{\chi} = Z' \overline{\chi}' \quad (3.138)$$

3.6.2 Pion-Massen als Funktion von χ'_{PCAC}

Das Ergebnis für die Pion-Masse lautet :

$$\begin{aligned} m_{\pi^{\pm}}^2 &= \overline{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \overline{\chi}^2 \ln \frac{\overline{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \overline{\chi}^2 \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \chi'_{PCAC} \rho \end{aligned} \quad (3.139)$$

Für den Fit wurde folgende Funktionen gewählt :

$$\begin{aligned} (a m_{\pi,lattice}^{PCAC})^2 [a m_{\chi,lattice}^{PCAC}] &= b_2 \overline{\chi}' + b_3 \overline{\chi}'^2 + b_4 a m_{\chi,lattice}^{PCAC} \\ &\equiv f_2 [a m_{\chi,lattice}^{PCAC}] \end{aligned} \quad (3.140)$$

mit den Fit-Parametern :

$$b_1 = \left(\frac{a\mu}{Z_A^2}\right)^2 \quad (3.141)$$

$$b_2 = a^2 Z' = 2B a \quad (3.142)$$

$$b_3 = a^2 \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) Z'^2 = \frac{32 B^2}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \quad (3.143)$$

$$b_4 = a^2 \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \rho Z' \quad (3.144)$$

$$b_4 = \frac{32 W_0 B}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) a^2 \quad (3.144)$$

Hier wurde der logarithmische Beitrag zur Masse nicht berücksichtigt, da er sich im Rahmen der Unsicherheit der Simulationsdaten nicht nachweisen lässt.

3.6.3 Pion-Zerfallskonstante f_π als Funktion von χ'_{PCAC}

Für die Pion-Zerfallskonstante gilt :

$$\frac{f_\pi}{F_0} = 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \left\{ L_{54} \bar{\chi} + (-L_{54} + W_{54}) \rho \frac{\chi'_{PCAC}}{\bar{\chi}} \right\} \quad (3.145)$$

Hieraus ergibt sich die Pion-Zerfallskonstante in Gitter-Einheiten zu :

$$\begin{aligned} a f_{\pi, lattice} [a m_{\chi, lattice}^{PCAC}] &= b_5 - b_6 \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_7 \frac{a m_{\chi, lattice}^{PCAC}}{\bar{\chi}'} + b_8 \bar{\chi}' \\ &\equiv f_1 [a m_{\chi, lattice}^{PCAC}] \end{aligned} \quad (3.146)$$

mit der Abkürzung :

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, lattice}^{PCAC} \right)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A} \right)^2}$$

Die Fit-Parameter sind hier :

$$b_1 = \left(\frac{a \mu}{Z_A} \right)^2 \quad (3.147)$$

$$b_5 = a F_0 \quad (3.148)$$

$$b_6 = \frac{Z' a}{16 \pi^2 F_0} = \frac{B}{8 \pi^2 F_0} \quad (3.149)$$

$$b_7 = \frac{4}{F_0} (-L_{54} + W_{54}) \rho a = \frac{8 W_0}{F_0} (-L_{54} + W_{54}) a^2 \quad (3.150)$$

$$b_8 = \left(\frac{4}{F_0} L_{54} - \frac{\ln \left(\frac{Z'}{\Lambda^2} \right)}{16 \pi^2 F_0} \right) Z' a = \frac{8 B}{F_0} L_{54} - \frac{\ln \left(\frac{Z'}{\Lambda^2} \right)}{8 \pi^2 F_0} B \quad (3.151)$$

Hierbei wurde benutzt, dass beispielsweise aus Gleichung (3.76) für ρ_0 folgt :

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \rho \cos(\omega) = \rho \frac{m_\chi^{PCAC}}{m_q} + \mathcal{O}(a^2) \\ &= \rho \frac{a m_\chi^{PCAC}}{\sqrt{(a m_\chi^{PCAC})^2 + \left(\frac{a \mu}{Z_A} \right)^2}} + \mathcal{O}(a^2) \end{aligned} \quad (3.152)$$

3.6.4 Pseudoskalares Matrixelement g_π als Funktion von χ'_{PCAC}

Für g_π gilt :

$$\begin{aligned} \frac{g_\pi}{F_0 B_0} &= 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) \bar{\chi} \\ &\quad + \frac{4}{F_0^2} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \rho \frac{\chi'_{PCAC}}{\bar{\chi}} \end{aligned} \quad (3.153)$$

Hieraus ergibt sich $g_\pi = Z_P g_{\pi, lattice}$ in Gitter-Einheiten zu :

$$\begin{aligned} a^2 g_{\pi, lattice} [a m_{\chi, lattice}^{PCAC}] &= b_9 - b_{10} \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_{11} \frac{a m_{\chi, lattice}^{PCAC}}{\bar{\chi}'} + b_{12} \bar{\chi}' \\ &\equiv f_3 [a m_{\chi, lattice}^{PCAC}] \end{aligned} \quad (3.154)$$

Die Fit-Parameter sind hier mit $Z' = \frac{2B}{a}$ und $B = B_0 \frac{Z_A}{Z_P}$:

$$b_1 = \left(\frac{a\mu}{Z_A^2} \right)^2 \quad (3.155)$$

$$b_9 = \frac{a^2 F_0 B_0}{Z_P} = \frac{a^2 F_0 B}{Z_A} \quad (3.156)$$

$$b_{10} = \frac{1}{Z_P} \frac{B_0 Z' a^2}{32 \pi^2 F_0} = \frac{1}{Z_A} \frac{B^2 a}{16 \pi^2 F_0} \quad (3.157)$$

$$\begin{aligned} b_{11} &= \frac{1}{Z_P} \frac{4B_0 a^2}{F_0} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \rho \\ &= \frac{1}{Z_A} \frac{8W_0 B}{F_0} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) a^3 \end{aligned} \quad (3.158)$$

$$\begin{aligned} b_{12} &= \frac{4B_0 a^2}{Z_P F_0} (4L_{86} - L_{54}) Z' - \frac{B_0 Z' a^2}{Z_P} \frac{\ln \left(\frac{Z'}{\Lambda^2} \right)}{32 \pi^2 F_0} \\ &= \frac{8B^2}{Z_A F_0} (4L_{86} - L_{54}) a - \frac{\ln \left(\frac{Z'}{\Lambda^2} \right)}{16 \pi^2 F_0} \frac{B^2 a}{Z_A} \end{aligned} \quad (3.159)$$

3.6.5 PCAC-Quark-Masse als Funktion von $a m_0$

Neben dem Zusammenhang von Pion-Masse und Pion-Zerfallskonstante mit der PCAC-Quark-Masse ist auch die Abhängigkeit dieser drei Größen von der nackten Gitter-Quark-Masse m_0 für einen Fit von Interesse. Dazu wird zunächst $|\chi^*|$ durch $m'_0 = m_0 - m_c$ ausgedrückt :

$$|\chi^*| = \frac{2B}{a} \sqrt{(a m_0 - a m_c)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \quad (3.160)$$

hierbei werden die selben Abkürzungen benutzt, wie bisher :

$$\begin{aligned} B &\equiv B_0 \frac{Z_A}{Z_P} \\ Z' &\equiv \frac{2B}{a} = \frac{2B_0}{a} \frac{Z_A}{Z_p} \end{aligned}$$

Für die PCAC-Quark-Masse (Gl. 3.76) gilt mit $\chi'_0 = 2B_0(m_0 - m_c)$:

$$2B_0 m_\chi^{PCAC} = \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86})$$

beziehungsweise in Gitter-Einheiten :

$$a m_{\chi, lattice}^{PCAC} = Z_2 a m'_0 + \frac{8}{F_0^2} (-2L_{86} + W_{86}) Z_2 \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \quad (3.161)$$

$$a m_{\chi, lattice}^{PCAC} [a m_0] = b_{27} a m'_0 + b_{26} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \equiv f_7 [a m_0] \quad (3.162)$$

Für die Fit-Parameter gilt hierbei mit $a m'_0 = a m_0 - a m_c \equiv a m_0 - b_{14}$:

$$b_{14} = a m_c \quad (3.163)$$

$$b_{15} = \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2 \quad (3.164)$$

$$b_{26} = \frac{8}{F_0^2} (-2L_{86} + W_{86}) \quad (3.165)$$

$$b_{27} = Z_2 \quad (3.166)$$

Für den Zweck dieser Fits wird Z_2 vorerst nicht auf den physikalischen Wert $Z_2 = 1$ fixiert, sondern als freier Parameter behandelt, da an dieser Stelle zunächst die Methodik der Fits an möglichst einfachen Modellen überprüft wird. Eine präzise Rechnung unter Berücksichtigung der physikalischen Parameter der Chiralen Störungstheorie wird jedoch zeigen, dass es für $Z_2 = 1$ offenbar nicht ausreicht, bei der PCAC-Quark-Masse als Funktion von $a m_0$ nur Gitter-Effekte bis $\mathcal{O}(a)$ zu berücksichtigen. Es ist ganz deutlich zu beobachten, dass hier die Gitter-Artefakte eine sehr große Rolle spielen, was in Abschnitt 3.7.2 näher erläutert wird.

3.6.6 Pion-Masse als Funktion von $a m_0$

Für die Pion-Masse folgt aus (3.85) :

$$\begin{aligned}
 (a m_{\pi,lattice})^2 &= 2 B a \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \\
 &+ \frac{B^2}{8 \pi^2 F_0^2} \left[(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2 \right] \ln \frac{\frac{2B}{a} \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2}}{\Lambda^2} \\
 &+ \frac{32 B^2}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \left[(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2 \right] \\
 &+ \frac{32 W_0 B a}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 4L_{86} + 2W_{86}) a m'_0
 \end{aligned} \tag{3.167}$$

mit

$$\rho_0 = \rho \cos(\omega) = \rho \frac{m'_0}{m_q} + \mathcal{O}(a^2) = 2W_0 a \frac{a m'_0}{\sqrt{(a m'_0)^2 + (a \mu)^2}} + \mathcal{O}(a^2) \tag{3.168}$$

In Gitter-Einheiten folgt unter Vernachlässigung des logarithmischen Terms :

$$\begin{aligned}
 (a m_{\pi,lattice})^2 [a m_0] &= b_{13} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} - b_{16} ((a m'_0)^2 + b_{15}) - b_{17} a m'_0 \\
 &\equiv f_4 [a m_0]
 \end{aligned} \tag{3.169}$$

Die Fit-Parameter ergeben sich zu :

$$b_{13} = 2 B a \tag{3.170}$$

$$b_{14} = a m_c \tag{3.171}$$

$$b_{15} = \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2 \tag{3.172}$$

$$b_{16} = \frac{32 B^2}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \tag{3.173}$$

$$b_{17} = \frac{32 W_0 B a}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 4L_{86} + 2W_{86}) \tag{3.174}$$

3.6.7 Pion-Zerfallskonstante f_π als Funktion von $a m_0$

Als Funktion der nackten Gitter-Quark-Masse lautet die Pion-Zerfallskonstante f_π (3.89) :

$$\begin{aligned}
 a f_{\pi,lattice} &= a F_0 - \frac{B}{8 \pi^2 F_0} \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \ln \frac{\frac{2B}{a} \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2}}{\Lambda^2} \\
 &+ \frac{8 B}{F_0} L_{54} \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2}
 \end{aligned}$$

$$+\frac{8 W_0 a^2}{F_0} (-L_{54} + W_{54}) \frac{a m'_0}{\sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2}} \quad (3.175)$$

Der Fit wurde mit folgender Funktion durchgeführt :

$$\begin{aligned} a f_{\pi,lattice} [a m_0] &= b_{22} - b_{23} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \ln \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} + \frac{b_{24} a m'_0}{\sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}} \\ &\quad + b_{25} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \\ &\equiv f_6 [a m_0] \end{aligned} \quad (3.176)$$

Die Fit-Parameter sind hier mit $a m'_0 = a m_0 - a m_c \equiv a m_0 - b_{14}$:

$$b_{14} = a m_c \quad (3.177)$$

$$b_{15} = \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A} \right)^2 \quad (3.178)$$

$$b_{22} = a F_0 \quad (3.179)$$

$$b_{23} = \frac{1}{8 \pi^2 F_0} B \quad (3.180)$$

$$b_{24} = \frac{8 W_0 a^2}{F_0} (-L_{54} + W_{54}) \quad (3.181)$$

$$b_{25} = \frac{8 B}{F_0} L_{54} - \frac{\ln \left(\frac{Z'}{\Lambda^2} \right)}{8 \pi^2 F_0} B \quad (3.182)$$

3.6.8 Pseudoskalares Matrixelement g_π als Funktion von $a m_0$

Das pseudoskalare Matrixelement g_π ist (3.89) :

$$\begin{aligned} a^2 g_{\pi,lattice} &= a^2 B F_0 - \frac{B^2}{16 \pi^2 F_0} a \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \ln \frac{\frac{2B}{a} \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2}}{\Lambda^2} \\ &\quad + \frac{8 B^2}{F_0} a (4L_{86} - L_{54}) \sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2} \\ &\quad + \frac{8 B W_0 a^3}{F_0} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \frac{a m'_0}{\sqrt{(a m'_0)^2 + \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A}\right)^2}} \end{aligned} \quad (3.183)$$

Der Fit wurde mit folgender Funktion durchgeführt :

$$\begin{aligned} a g_{\pi,lattice} [a m_0] &= b_{18} - b_{19} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \ln \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} + \frac{b_{20} a m'_0}{\sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}} \\ &\quad + b_{21} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \\ &\equiv f_5 [a m_0] \end{aligned} \quad (3.184)$$

Die Fit-Parameter sind hier :

$$b_{14} = a m_c \quad (3.185)$$

$$b_{15} = \left(\frac{a \mu_{lattice}}{Z_A} \right)^2 \quad (3.186)$$

$$b_{18} = a^2 B F_0 \quad (3.187)$$

$$b_{19} = \frac{1}{16 \pi^2 F_0} B^2 a \quad (3.188)$$

$$b_{20} = \frac{8 B W_0 a^3}{F_0} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \quad (3.189)$$

$$b_{21} = \frac{8 B^2}{F_0} a (4L_{86} - L_{54}) - \frac{\ln \left(\frac{Z'}{\Lambda^2} \right)}{16 \pi^2 F_0} B^2 a \quad (3.190)$$

3.6.9 Fit-Resultate für die Messgrößen als Funktion $a m_{PCAC}$

In einem ersten Schritt werden zunächst für alle relevanten Größen Einzel-Fits durchgeführt. Dies dient zum einen dazu sicherzustellen, dass die Modellfunktionen die Daten auch tatsächlich adäquat repräsentieren. Andererseits dienen sie als Referenz, um in den noch folgenden immer komplexer werdenden Fits abweichende Ergebnisse zu erkennen.

Im Anschluss an die Einzel-Fits folgen die Ergebnisse für einen gemeinsamen Fit der betrachteten Größen. An den Werten für die Modellparameter lässt sich direkt ablesen, dass beide Ansätze vergleichbare Ergebnisse liefern.

Zur Veranschaulichung der Größenordnungen der jeweiligen Beiträge zu $(a m_\pi)^2$ und $a F_\pi$ sind in den Abbildungen neben dem tatsächlichen Fit-Ergebnis auch die Korrekturen durch die Terme b_3 und b_4 beziehungsweise b_5 , b_6 und b_7 dargestellt. Wie man auch an den numerischen Werten der Unsicherheiten der beiden Parameter erkennen kann, liefert der b_3 -Term keinen erkennbaren Beitrag. Die $\mathcal{O}(a)$ -Korrekturen durch $b_4 a m_\chi^{PCAC}$ sind dagegen deutlich sichtbar.

Der Übersichtlichkeit halber werden die für den Fit verwendeten Funktionen zusammen mit den Werten für die Fit-Parameter für jeden Graph noch einmal angegeben.

Die hier gezeigten Ergebnisse beziehen sich auf den Fall einer Twist-Masse von $a \mu = 0.01$ sowie $\beta = 0.67$, wobei die Größe des Gitters $12^3 \times 24$ beträgt. Hierbei beträgt die Ausdehnung des Gitters etwa $L \simeq 2$ fm und der Gitterabstand $a \simeq 0.18$ fm, wobei eine minimale Pion-Masse von ungefähr $m_\pi \simeq 360$ MeV gefunden wurde. Anzeichen einer Metastabilität in der Nähe dieses Minimums sind kaum zu finden, so dass sich die hier betrachteten Datenpunkte offenbar alle innerhalb des Gültigkeitsbereichs der Approximation $\eta \equiv \frac{\rho}{\chi} \ll 1$ befinden. Im nächsten Kapitel werden zusätzlich die Daten für ein $16^3 \times 32$ -Gitter mit $\beta = 0.74$ sowie der Fall $\mu = 0$ betrachtet, um die Genauigkeit der Vorhersage zu steigern.

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Modellfunktionen die Daten mit hoher Präzision wiedergeben, was aufgrund der vergleichsweise großen Zahl unabhängiger Fitparameter jedoch zu erwarten ist. Mit Hilfe eines verallgemeinerten Least-Squares-Fit ergeben sich nun folgende Werte für die Parameter aus dem Datensatz der Kollaboration [35], der mir von F. Farchioni zur Verfügung gestellt wurde :

Pion-Massenquadrate

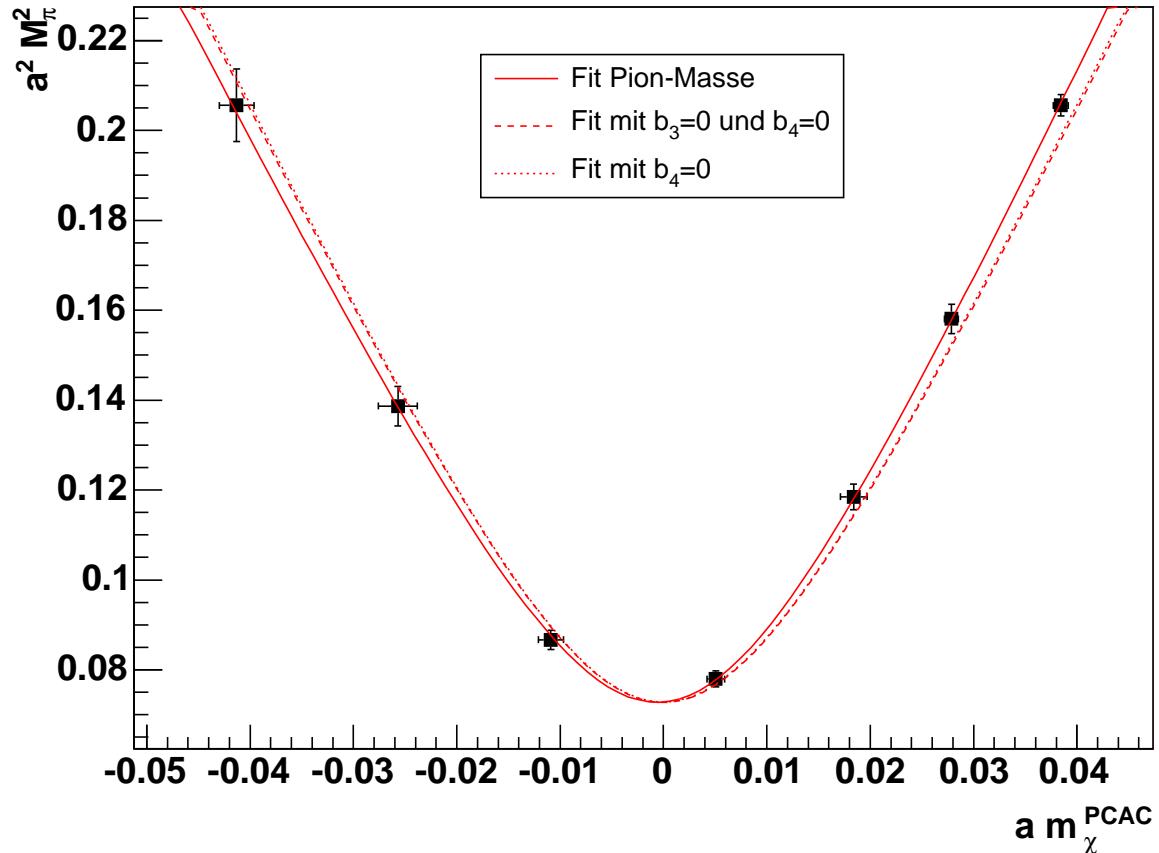


Abbildung 3.6: Fit Pion-Massenquadrate (f2)

$$(a m_{\pi, \text{lattice}})^2 = b_2 \bar{\chi}' + b_3 \bar{\chi}'^2 + b_4 a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{(a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}})^2 + b_1}$$

	Fitparameter
b_1	0.00023 ± 0.00018
b_2	4.8 ± 1.5
b_3	0 ± 30
b_4	0.19 ± 0.12

Pion-Zerfallskonstante

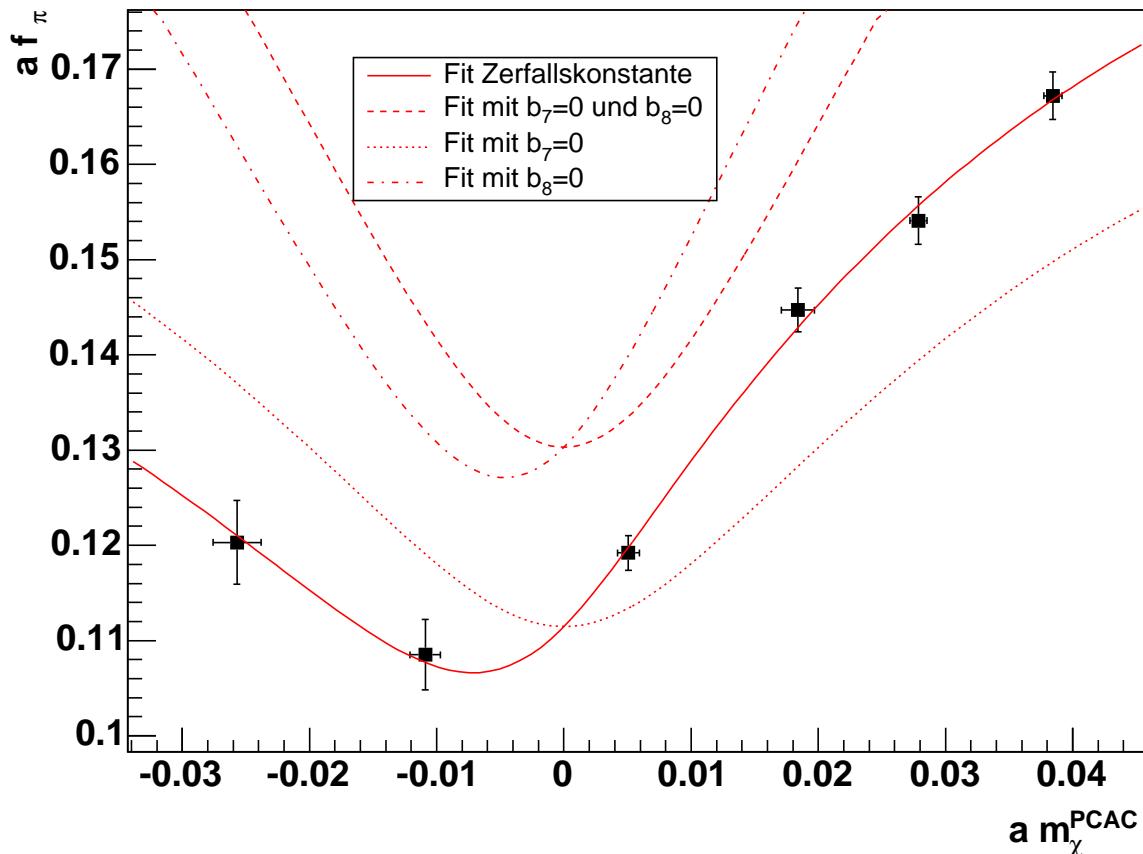


Abbildung 3.7: Fit Pion-Zerfallskonstante (f1)

Um ein brauchbares Fit-Resultat zu erreichen, wurde hier der Punkt mit $a m_{\text{PCAC}} = -0,0413$ nicht im Fit berücksichtigt.

$$\begin{aligned} a f_{\pi, \text{lattice}} &= b_5 - b_6 \overline{\chi}' \ln \overline{\chi}' + b_7 \frac{a m_\chi^{\text{PCAC}}}{\overline{\chi}'} + b_8 \overline{\chi}' \\ \overline{\chi}' &\equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}\right)^2 + b_1} \end{aligned}$$

	Fitparameter
b_1	0.00018 ± 0.00027
b_5	0.069 ± 0.095
b_6	1.1 ± 2.2
b_7	0.0180 ± 0.0039
b_8	-1.4 ± 5.0

Pseudoskalares Matrixelement

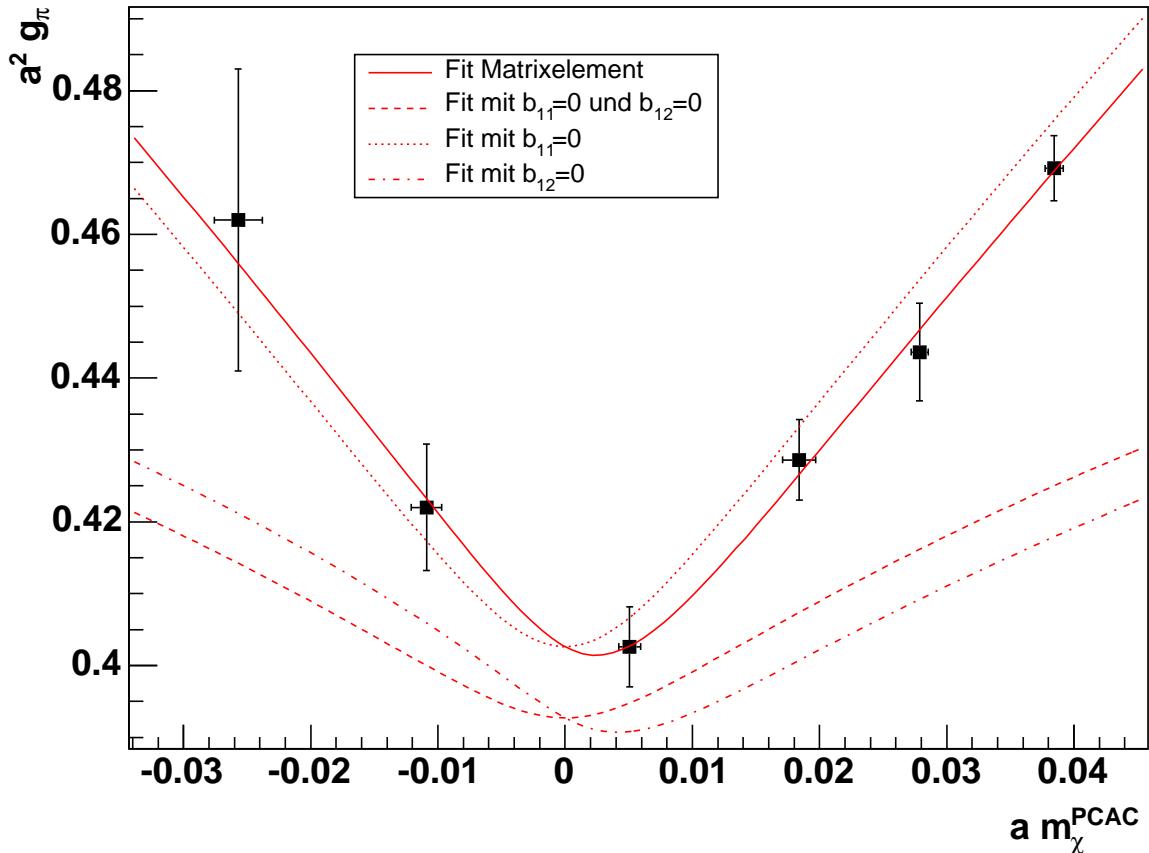


Abbildung 3.8: Fit pseudoskalares Matrixelement (f3)

Um ein brauchbares Fit-Resultat zu erreichen, wurde auch hier der Punkt mit $a m_\chi^{\text{PCAC}} = -0,0413$ nicht im Fit berücksichtigt.

$$\begin{aligned} a^2 g_{\pi,lattice} &= b_9 - b_{10} \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_{11} \frac{a m_{\chi,lattice}^{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}'} + b_{12} \bar{\chi}' \\ \bar{\chi}' &\equiv \sqrt{\left(a m_{\chi,lattice}^{\text{PCAC}}\right)^2 + b_1} \end{aligned}$$

	Fitparameter
b_1	0.00006 ± 0.00044
b_9	0.38 ± 0.21
b_{10}	0.4 ± 4.5
b_{11}	-0.0072 ± 0.0084
b_{12}	1.3 ± 9.6

Pion-Massenquadrate

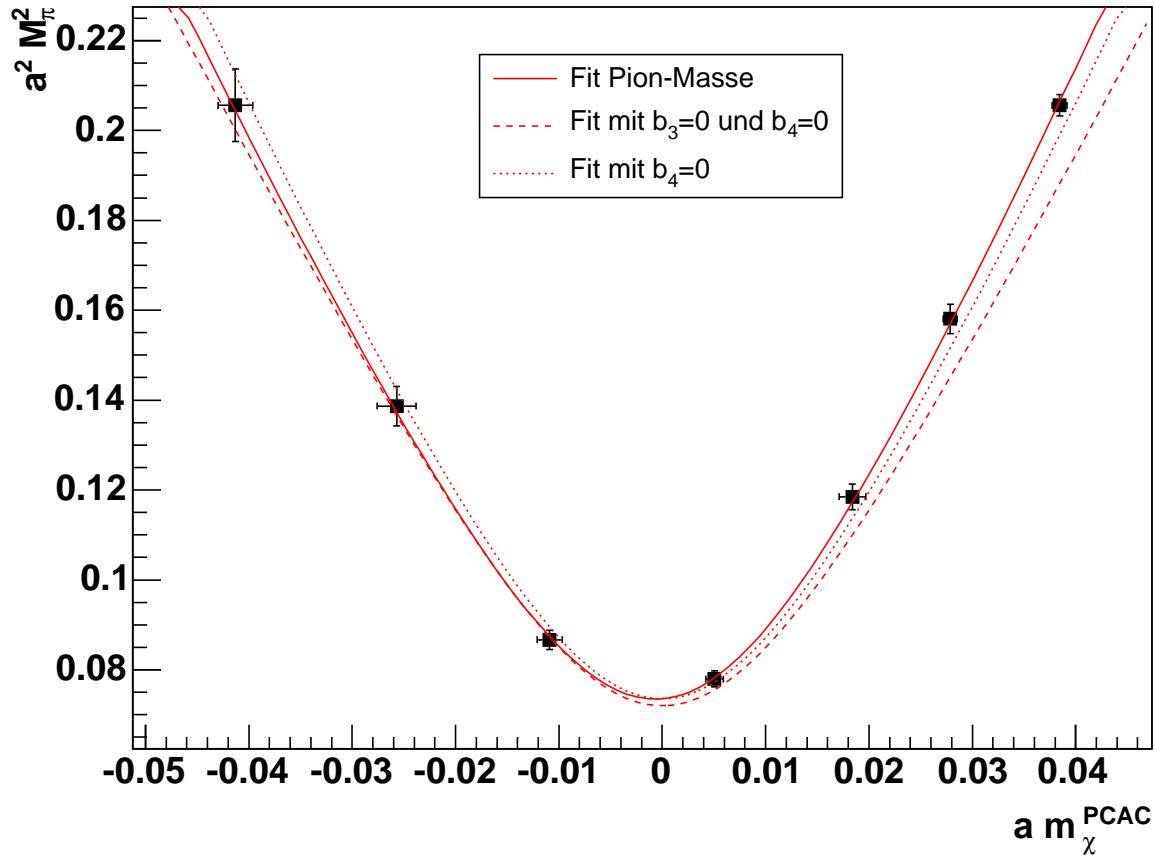


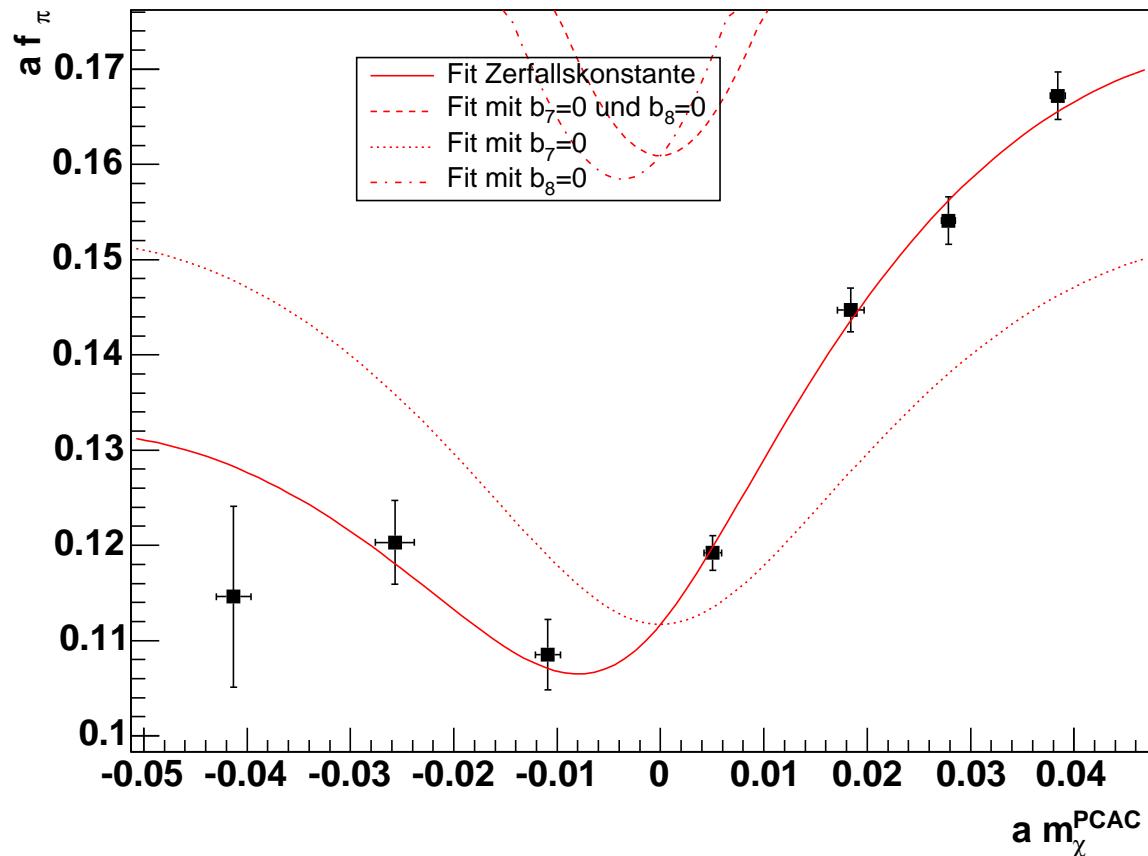
Abbildung 3.9: Fit Pion-Massenquadrate ($f_1+f_2+f_3$)

$$(a m_{\pi,lattice})^2 = b_2 \bar{\chi}' + b_3 \bar{\chi}'^2 + b_4 a m_{\chi,lattice}^{PCAC}$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{(a m_{\chi,lattice}^{PCAC})^2 + b_1}$$

	Fitparameter
b_1	0.000253 ± 0.000059
b_2	4.52 ± 0.70
b_3	6 ± 17
b_4	0.19 ± 0.15
b_5	0.048 ± 0.016
b_6	1.72 ± 0.59
b_7	0.0209 ± 0.0011
b_8	-3.1 ± 1.6
b_9	0.307 ± 0.043
b_{10}	1.9 ± 1.6
b_{11}	-0.0152 ± 0.0068
b_{12}	-1.8 ± 4.4

Pion-Zerfallskonstante

Abbildung 3.10: Fit Pion-Zerfallskonstante ($f_1+f_2+f_3$)

$$a f_{\pi, lattice} = b_5 - b_6 \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_7 \frac{a m_\chi^{PCAC}}{\bar{\chi}'} + b_8 \bar{\chi}'$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, lattice}^{PCAC}\right)^2 + b_1}$$

	Fitparameter
b_1	0.000253 ± 0.000059
b_2	4.52 ± 0.70
b_3	6 ± 17
b_4	0.19 ± 0.15
b_5	0.048 ± 0.016
b_6	1.72 ± 0.59
b_7	0.0209 ± 0.0011
b_8	-3.1 ± 1.6
b_9	0.307 ± 0.043
b_{10}	1.9 ± 1.6
b_{11}	-0.0152 ± 0.0068
b_{12}	-1.8 ± 4.4

Pseudoskalares Matrixelement

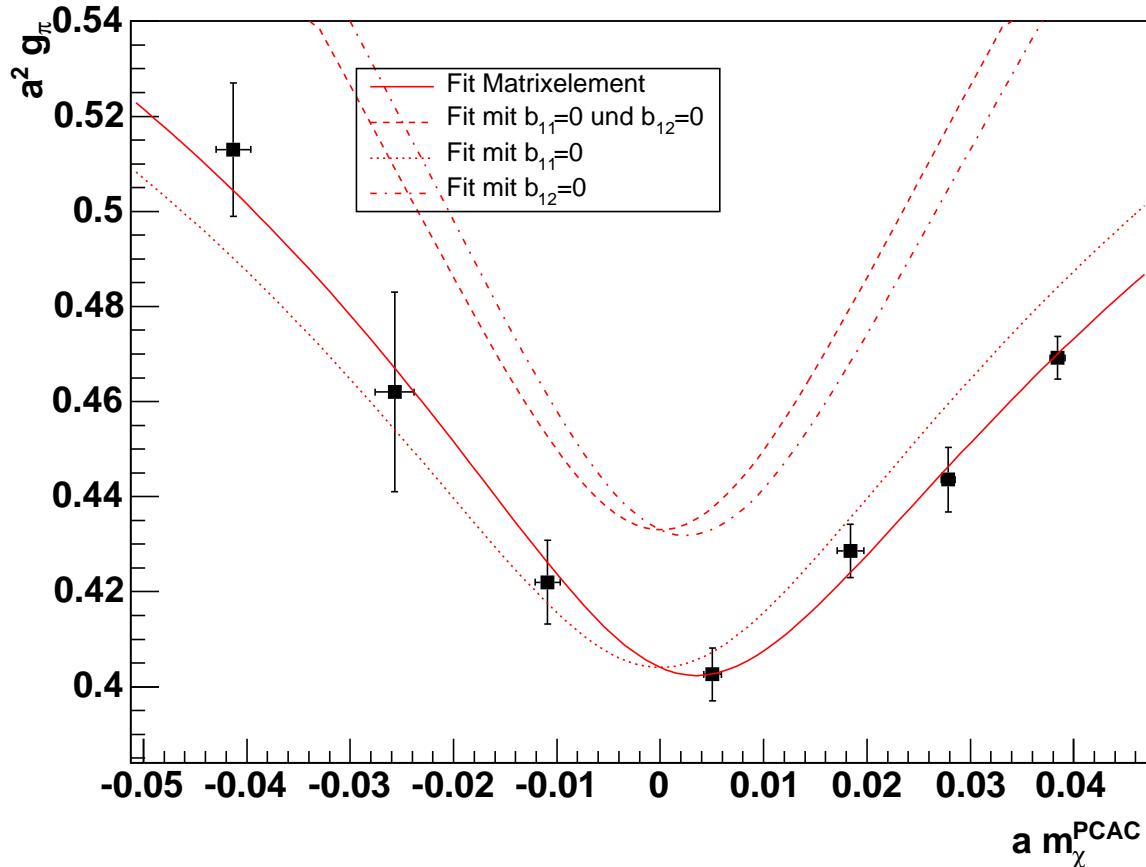


Abbildung 3.11: Fit pseudoskalares Matrixelement (f1+f2+f3)

$$a^2 g_{\pi, \text{lattice}} = b_9 - b_{10} \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_{11} \frac{a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}'} + b_{12} \bar{\chi}'$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}\right)^2 + b_1}$$

	Fitparameter
b_1	0.000253 ± 0.000059
b_2	4.52 ± 0.70
b_3	6 ± 17
b_4	0.19 ± 0.15
b_5	0.048 ± 0.016
b_6	1.72 ± 0.59
b_7	0.0209 ± 0.0011
b_8	-3.1 ± 1.6
b_9	0.307 ± 0.043
b_{10}	1.9 ± 1.6
b_{11}	-0.0152 ± 0.0068
b_{12}	-1.8 ± 4.4

3.6.10 Fit-Resultate für die Messgrößen als Funktion von $a m'_0$

In den folgenden Abbildungen sind die Fit-Resultate für die betrachteten Messgrößen als Funktion der nackten Gitter-Quark-Masse dargestellt. Auch hier sind wieder die Beiträge der verschiedenen Terme durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

Das Ziel dieser Analyse ist es, zu überprüfen, ob die Ergebnisse für den Fit auch bei Betrachtung der Messgrößen in Abhängigkeit von der nackten Gitter-Quark-Masse sinnvoll sind.

Qualitativ gesehen werden die Daten durchaus vernünftig durch die Fit-Funktionen wiedergegeben. Aus diesem Grund werden im nächsten Schritt beide Ansätze kombiniert, wobei nun tatsächlich alle verfügbaren Messgrößen im Fit berücksichtigt werden.

Pion-Massenquadrate

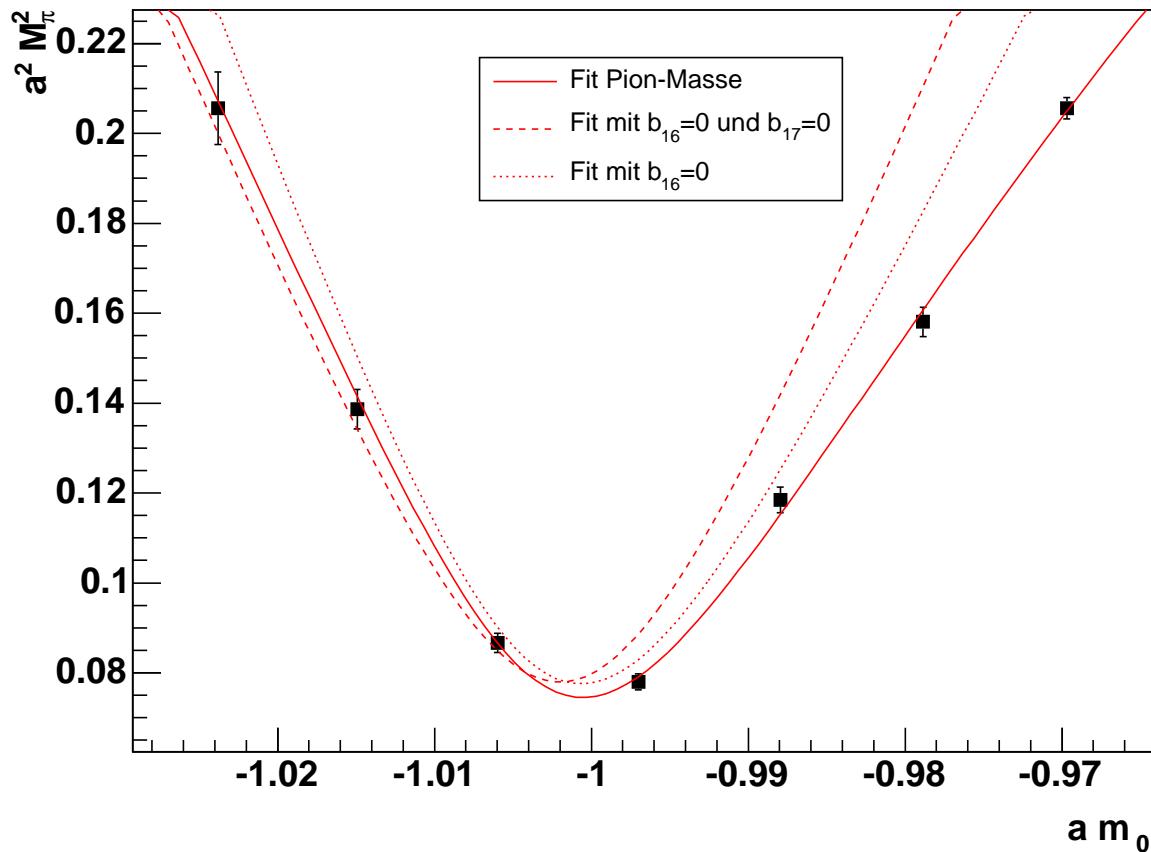


Abbildung 3.12: Fit Pion-Massenquadrate ($f_4+f_5+f_6+f_7$)

$$a^2 m_\pi^2 = b_{13} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} - b_{16} ((a m'_0)^2 + b_{15}) - b_{17} a m'_0$$

	Fitparameter
b_{13}	8.45 ± 0.50
b_{14}	-1.00214 ± 0.00077
b_{15}	0.0000852 ± 0.0000094
b_{16}	35 ± 14
b_{17}	1.22 ± 0.43
b_{18}	0.307 ± 0.028
b_{19}	4.1 ± 1.3
b_{20}	-0.0313 ± 0.0057
b_{21}	-8.3 ± 3.9
b_{22}	0.0577 ± 0.0081
b_{23}	2.15 ± 0.43
b_{24}	0.0135 ± 0.0027
b_{25}	-4.5 ± 1.3
b_{26}	-0.344 ± 0.088
b_{27}	1.558 ± 0.073

Pion-Zerfallskonstante

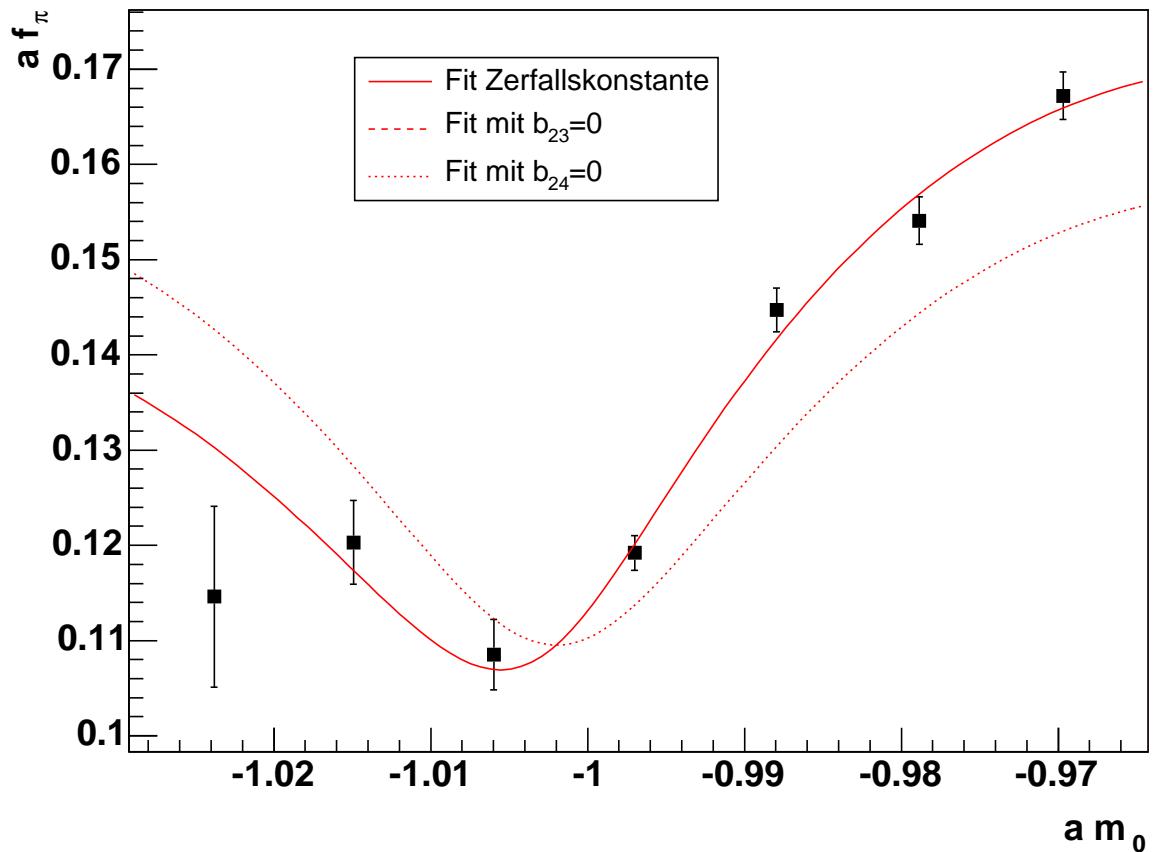


Abbildung 3.13: Fit Pion-Zerfallskonstante ($f_4+f_5+f_6+f_7$)

$$a f_\pi = b_{22} + \frac{b_{24} a m'_0}{\sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}} \\ - b_{23} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \ln \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \\ + b_{25} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}$$

	Fitparameter
b_{13}	8.45 ± 0.50
b_{14}	-1.00214 ± 0.00077
b_{15}	0.0000852 ± 0.0000094
b_{16}	35 ± 14
b_{17}	1.22 ± 0.43
b_{18}	0.307 ± 0.028
b_{19}	4.1 ± 1.3
b_{20}	-0.0313 ± 0.0057
b_{21}	-8.3 ± 3.9
b_{22}	0.0577 ± 0.0081
b_{23}	2.15 ± 0.43
b_{24}	0.0135 ± 0.0027
b_{25}	-4.5 ± 1.3
b_{26}	-0.344 ± 0.088
b_{27}	1.558 ± 0.073

Pseudoskalares Matrixelement

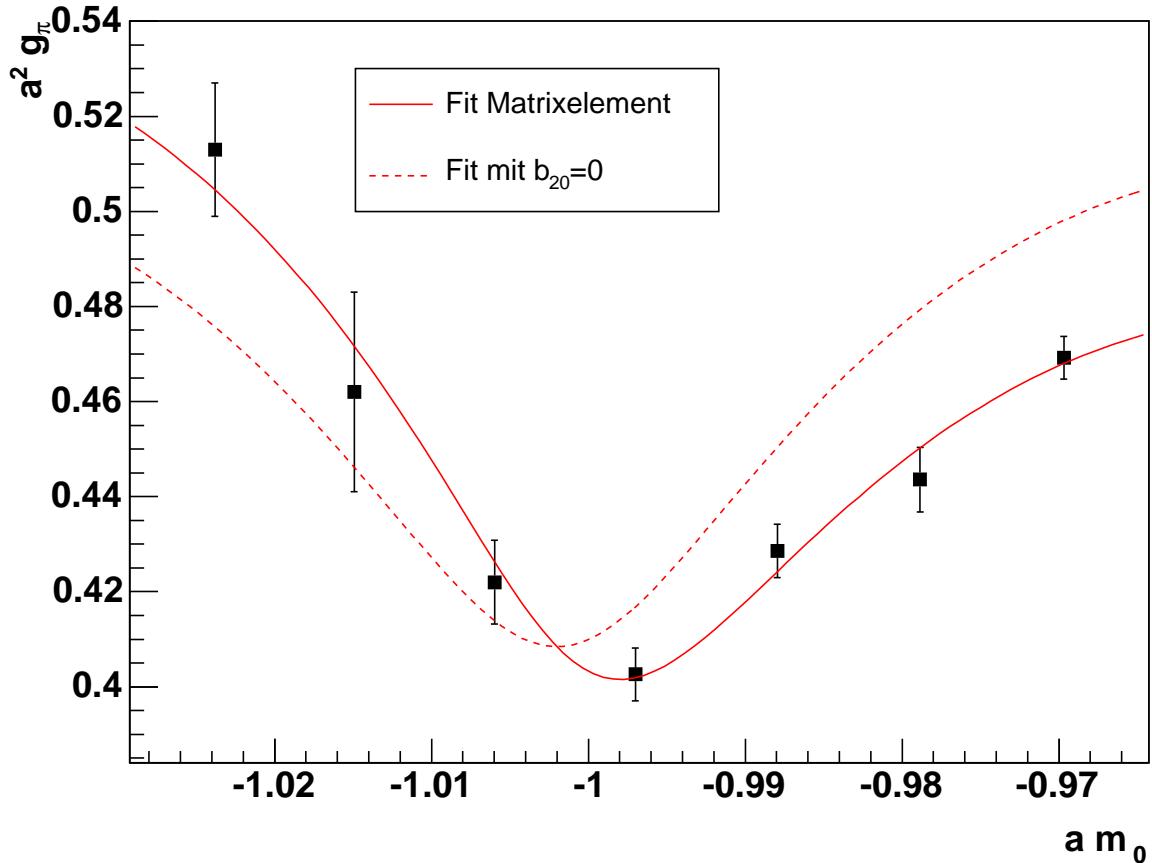


Abbildung 3.14: Fit pseudoskalares Matrixelement ($f_4+f_5+f_6+f_7$)

$$a g_\pi = b_{18} + \frac{b_{20} a m'_0}{\sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}} \\ - b_{19} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \ln \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}} \\ + b_{21} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}$$

	Fitparameter
b_{13}	8.45 ± 0.50
b_{14}	-1.00214 ± 0.00077
b_{15}	0.0000852 ± 0.0000094
b_{16}	35 ± 14
b_{17}	1.22 ± 0.43
b_{18}	0.307 ± 0.028
b_{19}	4.1 ± 1.3
b_{20}	-0.0313 ± 0.0057
b_{21}	-8.3 ± 3.9
b_{22}	0.0577 ± 0.0081
b_{23}	2.15 ± 0.43
b_{24}	0.0135 ± 0.0027
b_{25}	-4.5 ± 1.3
b_{26}	-0.344 ± 0.088
b_{27}	1.558 ± 0.073

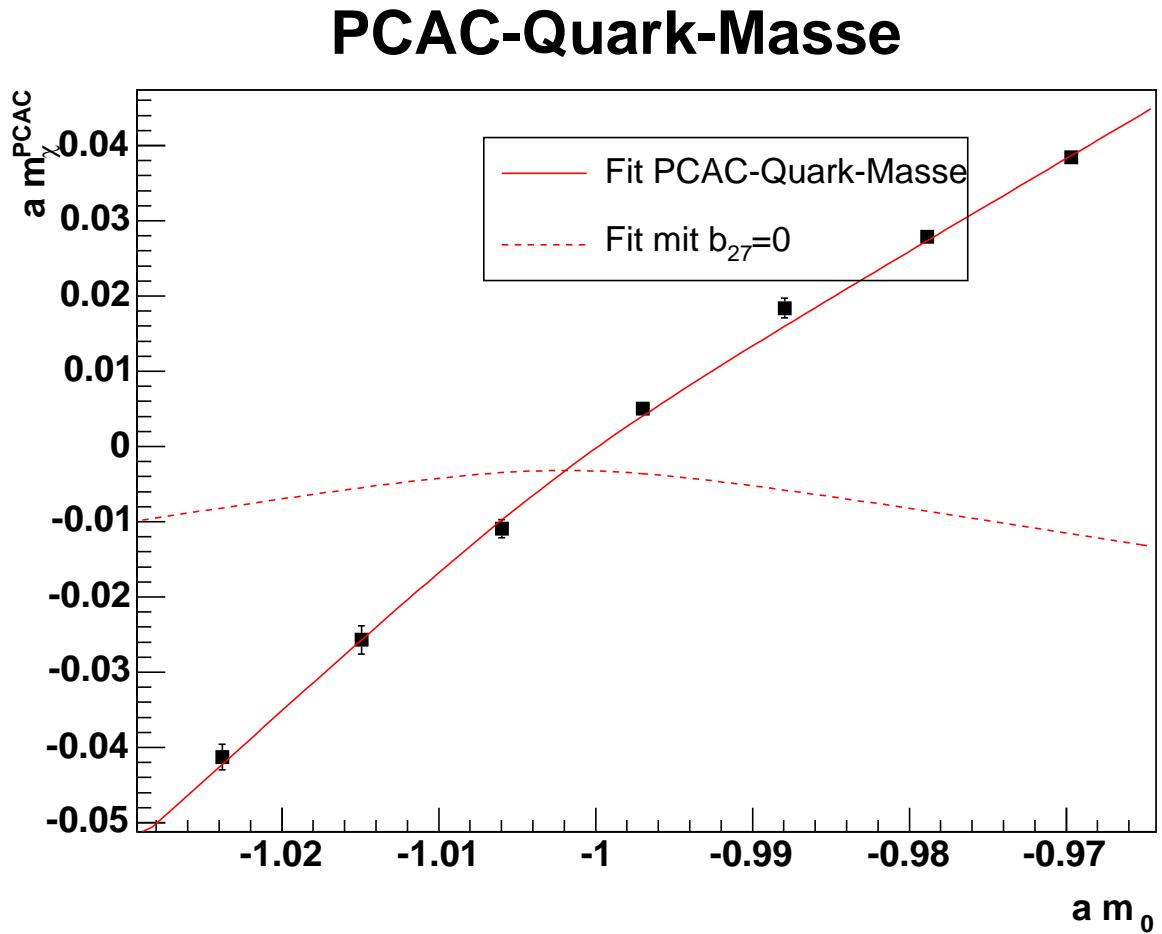


Abbildung 3.15: Fit PCAC-Quark-Masse (f4+f5+f6+f7)

$$a m_{PCAC} = b_{27} a m'_0 + b_{26} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}$$

	Fitparameter
b ₁₃	8.45 ± 0.50
b ₁₄	-1.00214 ± 0.00077
b ₁₅	0.0000852 ± 0.0000094
b ₁₆	35 ± 14
b ₁₇	1.22 ± 0.43
b ₁₈	0.307 ± 0.028
b ₁₉	4.1 ± 1.3
b ₂₀	-0.0313 ± 0.0057
b ₂₁	-8.3 ± 3.9
b ₂₂	0.0577 ± 0.0081
b ₂₃	2.15 ± 0.43
b ₂₄	0.0135 ± 0.0027
b ₂₅	-4.5 ± 1.3
b ₂₆	-0.344 ± 0.088
b ₂₇	1.558 ± 0.073

3.6.11 Gemeinsamer Fit für alle Messgrößen

Wie es sich zeigt, liefern sowohl die Fits der Messgrößen als Funktion der PCAC-Quark-Masse als auch die Fits für die selben Größen als Funktion der nackten Gitter-Quark-Masse plausible Resultate. Es ist nun naheliegend, beide Ansätze geeignet zu kombinieren. Der beste Weg dies zu erreichen ist es, die Pion-Masse und die Zerfallskonstanten in Abhängigkeit von der PCAC-Quark-Masse zu betrachten. Die PCAC-Quark-Masse wird dabei nun als Funktion der nackten Gitter-Quark-Masse aufgefasst.

Hier zeigt sich auch erstmals eine der großen Stärken der *Generalized-Nonlinear-Least-Squares* Methode. Für den Algorithmus ist es nicht wichtig, ob die Modellfunktionen in expliziter Gestalt gegeben sind. Es ist ohne weiteres möglich, mit impliziten Modelldarstellungen zu arbeiten. So wird hier über die Verknüpfung der PCAC-Quark-Masse mit der nackten Gitter-Quark-Masse auch die Verknüpfung aller übrigen Größen mit der nackten Masse realisiert.

In den folgenden Abbildungen sind die Resultate für einen gemeinsamen Fit aller Messgrößen dargestellt. Wie bisher, sind auch hier wieder die Beiträge der verschiedenen Terme durch gestrichelte Linien gekennzeichnet. Außerdem wurde $b_{15} = 0.0001 = (a\mu)^2$ gesetzt.

Der Vergleich mit den beiden vorhergehenden Analysen zeigt, dass diese Ergebnisse durchaus plausibel sind, so dass es sinnvoll erscheint, zur Maximierung der Vorhersagekraft im folgenden mit einem Gesamt-Fit aller betrachteten Größen zu arbeiten.

Pion-Massenquadrate

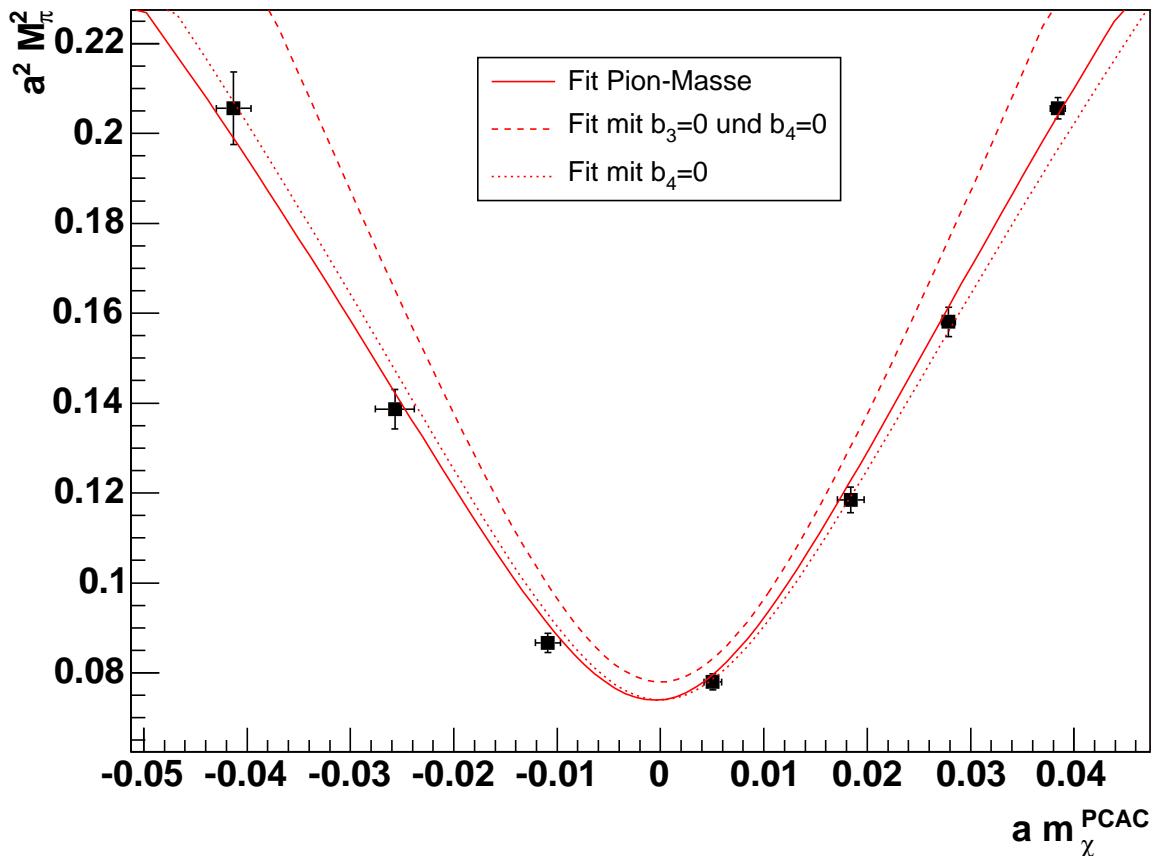


Abbildung 3.16: Fit Pion-Massenquadrate ($f_1+f_2+f_3+f_7$)

$$(a m_{\pi, lattice})^2 = b_2 \bar{\chi}' + b_3 \bar{\chi}'^2 + b_4 a m_{\chi, lattice}^{PCAC}$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{(a m_{\chi, lattice}^{PCAC})^2 + b_1}$$

	Fitparameter
b_1	0.000189 ± 0.000040
b_2	5.67 ± 0.53
b_3	-21 ± 12
b_4	0.20 ± 0.11
b_5	0.052 ± 0.022
b_6	1.88 ± 0.81
b_7	0.0206 ± 0.0023
b_8	-3.7 ± 2.1
b_9	0.314 ± 0.064
b_{10}	2.3 ± 2.4
b_{11}	-0.0150 ± 0.0057
b_{12}	-3.2 ± 6.2
b_{14}	-1.00282 ± 0.00052
b_{26}	-0.394 ± 0.058
b_{27}	1.582 ± 0.044

Pion-Zerfallskonstante

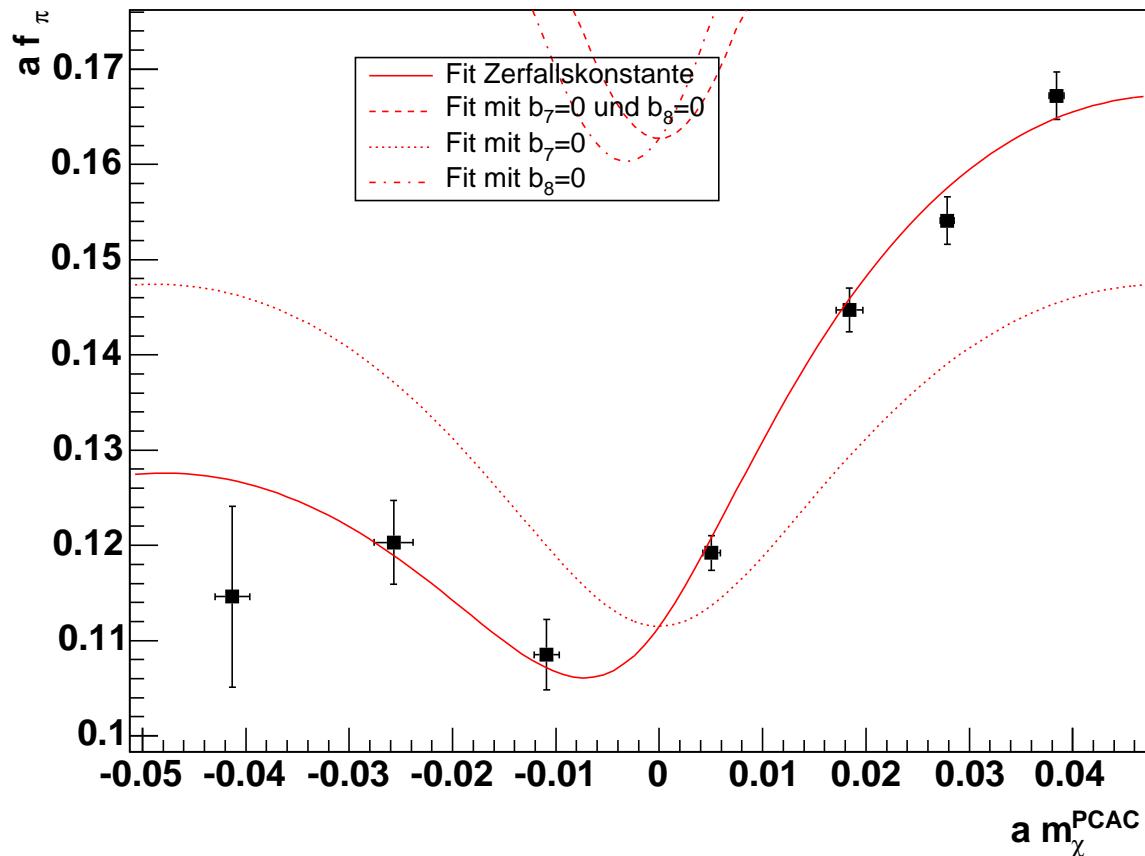
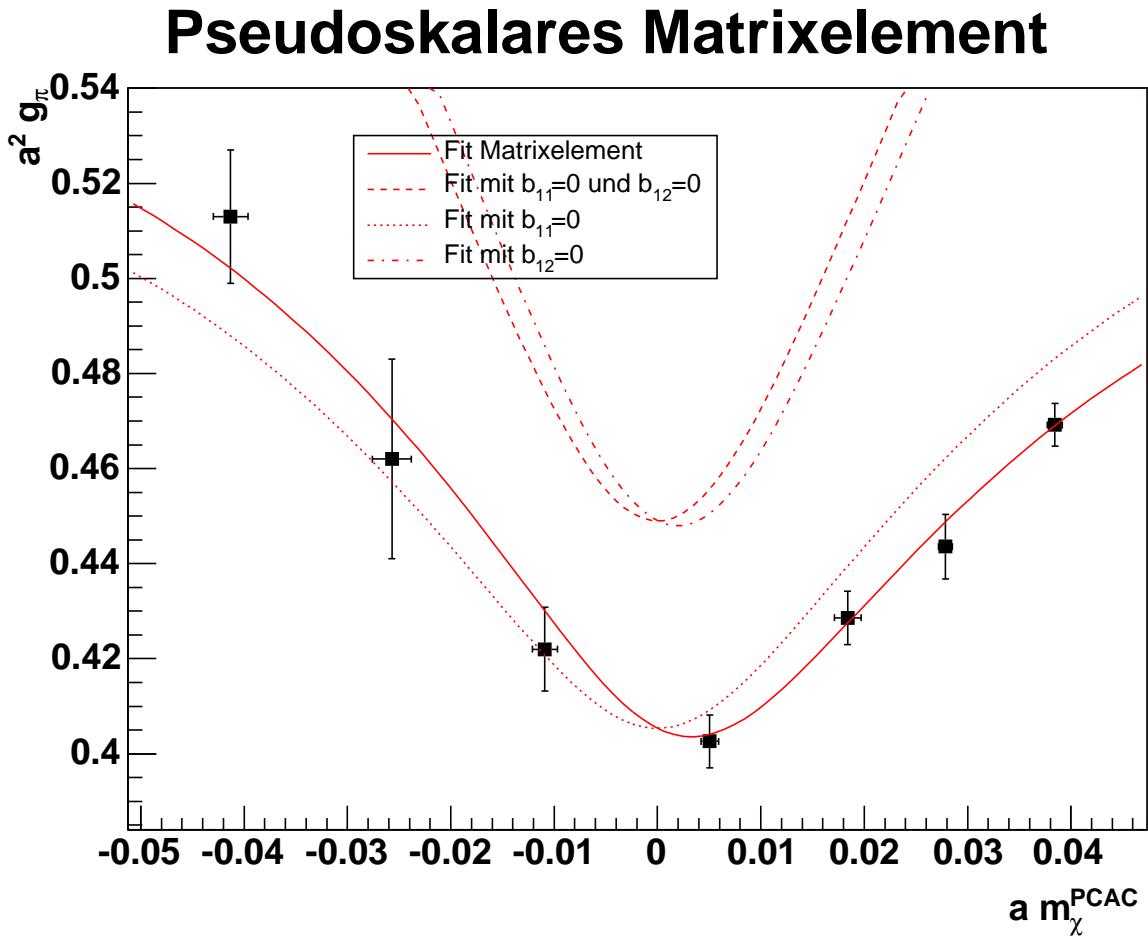


Abbildung 3.17: Fit Pion-Zerfallskonstante ($f_1+f_2+f_3+f_7$)

$$a f_{\pi, \text{lattice}} = b_5 - b_6 \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_7 \frac{a m_\chi^{PCAC}}{\bar{\chi}'} + b_8 \bar{\chi}'$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, \text{lattice}}^{PCAC}\right)^2 + b_1}$$

	Fitparameter
b_1	0.000189 ± 0.000040
b_2	5.67 ± 0.53
b_3	-21 ± 12
b_4	0.20 ± 0.11
b_5	0.052 ± 0.022
b_6	1.88 ± 0.81
b_7	0.0206 ± 0.0023
b_8	-3.7 ± 2.1
b_9	0.314 ± 0.064
b_{10}	2.3 ± 2.4
b_{11}	-0.0150 ± 0.0057
b_{12}	-3.2 ± 6.2
b_{14}	-1.00282 ± 0.00052
b_{26}	-0.394 ± 0.058
b_{27}	1.582 ± 0.044

Abbildung 3.18: Fit pseudoskalares Matrixelement ($f_1+f_2+f_3+f_7$)

$$a^2 g_{\pi, \text{lattice}} = b_9 - b_{10} \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_{11} \frac{a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}'} + b_{12} \bar{\chi}'$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}\right)^2 + b_1}$$

	Fitparameter
b_1	0.000189 ± 0.000040
b_2	5.67 ± 0.53
b_3	-21 ± 12
b_4	0.20 ± 0.11
b_5	0.052 ± 0.022
b_6	1.88 ± 0.81
b_7	0.0206 ± 0.0023
b_8	-3.7 ± 2.1
b_9	0.314 ± 0.064
b_{10}	2.3 ± 2.4
b_{11}	-0.0150 ± 0.0057
b_{12}	-3.2 ± 6.2
b_{14}	-1.00282 ± 0.00052
b_{26}	-0.394 ± 0.058
b_{27}	1.582 ± 0.044

PCAC-Quark-Masse

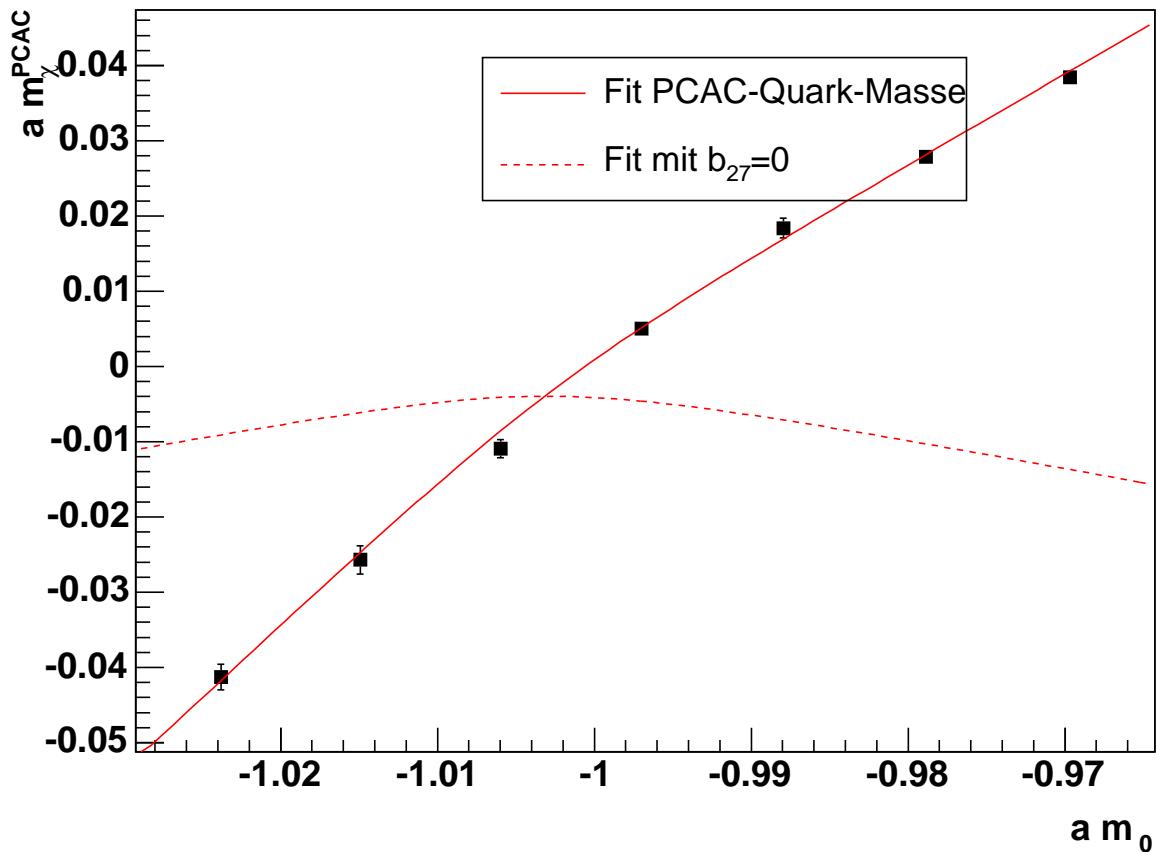


Abbildung 3.19: Fit PCAC-Quark-Masse (f1+f2+f3+f7)

	Fitparameter
b ₁	0.000189 ± 0.000040
b ₂	5.67 ± 0.53
b ₃	-21 ± 12
b ₄	0.20 ± 0.11
b ₅	0.052 ± 0.022
b ₆	1.88 ± 0.81
b ₇	0.0206 ± 0.0023
b ₈	-3.7 ± 2.1
b ₉	0.314 ± 0.064
b ₁₀	2.3 ± 2.4
b ₁₁	-0.0150 ± 0.0057
b ₁₂	-3.2 ± 6.2
b ₁₄	-1.00282 ± 0.00052
b ₂₆	-0.394 ± 0.058
b ₂₇	1.582 ± 0.044

$a m_{PCAC} = b_{27} a m'_0 + b_{26} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}$

3.6.12 Gemeinsamer Fit für alle Messgrößen mit $Z_A = 0.952$

Der wesentliche Fit-Parameter war bisher die Größe b_2 , die im wesentlichen für den Krümmungsradius im Minimum verantwortlich ist. Lässt man nun diese Größe als freien Fit-Parameter zu, so kommt es zu einem Effekt, der sich besonders gut im Fall der Pion-Masse beobachten lässt. Die Breite des Minimums ist so beschaffen, dass bereits die Terme führender Ordnung allein die Daten sehr gut wiedergeben. Beiträge der nächstführenden Ordnungen werden dadurch völlig überdeckt. Aus diesem Grund wird im folgenden nun ein anderer Ansatz gewählt.

Da alle wichtigen Fit-Parameter stark von der Größe von $b_2 = \frac{1}{Z_A^2}$ abhängen, wird dieser Faktor nun auf den physikalisch korrekten Wert fixiert. Da der Renormierungsfaktor Z_A aber sowohl von der Wahl der Gitter-Konstante beziehungsweise der Größe von β als auch von der verwendeten Wirkung abhängt, muss dieser Faktor aus den Simulationsdaten extrahiert werden. Die Werte für Z_A sind zusammen mit den anderen Simulationsdaten im Anhang zu finden.

Da die Kenntnis der Größe des Renormierungsfaktors Z_A aber mit einer gewissen Unsicherheit behaftet ist, wird dies bei der Berechnung der Unsicherheiten der Fit-Parameter explizit berücksichtigt. In jedem einzelnen Monte-Carlo Sample wird ein neuer Wert für Z_A anhand einer Gaußverteilung generiert mit der Unsicherheit als Standardabweichung und dem Messwert für Z_A als Mittelwert.

In den folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse für einen gemeinsamen Fit aller Messgrößen dargestellt. Wie bisher, sind auch hier wieder die Beiträge der verschiedenen Terme durch gestrichelte Linien gekennzeichnet. Außerdem wurden b_1 und b_{15} auf den Wert $b_{15} = b_1 = \frac{0.0001}{Z_A^2} = \frac{(a\mu)^2}{Z_A^2} = 0.0001104$ fixiert.

Vergleicht man nun diese Ergebnisse mit den Resultaten der vorhergehenden Analysen, so sind nur kleine Abweichungen der Werte der relevanten Modellparameter zu beobachten. Dennoch erhöht sich durch diese zusätzliche Einschränkung des Parameterbereichs der Modellfunktionen die Vorhersagekraft für die übrigen Fit-Parameter. Somit liefert die hier betrachtete Analyse die an dieser Stelle beste Abschätzung für die Größe der Niederenergieeffizienten der Chiralen Störungstheorie. Eine weitere Verbesserung lässt sich nur noch durch Eliminieren sämtlicher Redundanzen innerhalb der Menge der Fit-Parameter erzielen, was der Inhalt des nächsten Abschnitts sein wird.

Pion-Massenquadrate

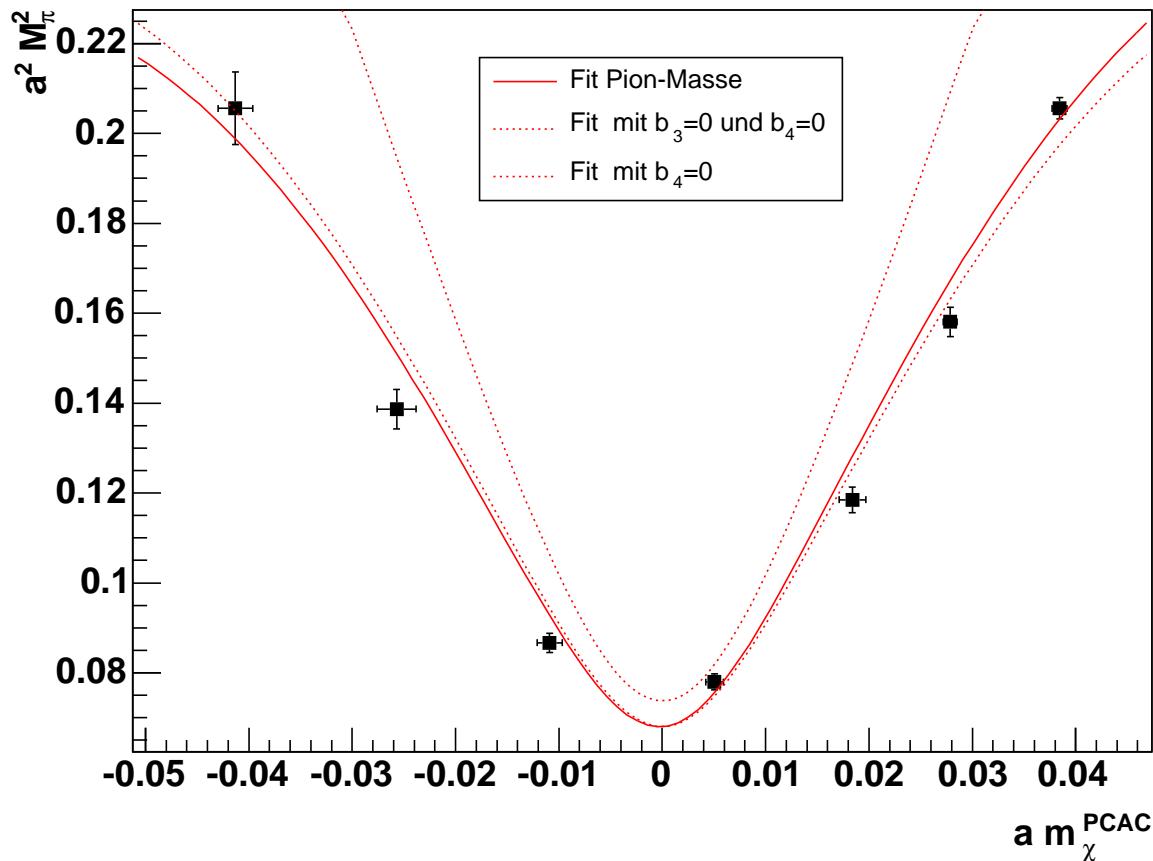


Abbildung 3.20: Fit Pion-Massenquadrate ($f_1+f_2+f_3+f_7$)

$$(a m_{\pi, lattice})^2 = b_2 \bar{\chi}' + b_3 \bar{\chi}'^2 + b_4 a m_{\chi, lattice}^{PCAC}$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{(a m_{\chi, lattice}^{PCAC})^2 + b_1}$$

$$b_1 = \frac{0.0001}{Z_A^2} = \frac{(a\mu)^2}{Z_A^2} = 0.0001104$$

	Fitparameter
b_2	7.02 ± 0.15
b_3	-51.8 ± 5.5
b_4	0.15 ± 0.11
b_5	0.0687 ± 0.0092
b_6	1.48 ± 0.39
b_7	0.0187 ± 0.0015
b_8	-2.8 ± 1.1
b_9	0.348 ± 0.019
b_{10}	1.5 ± 1.0
b_{11}	-0.0143 ± 0.0063
b_{12}	-1.5 ± 2.8
b_{14}	-1.00288 ± 0.00019
b_{26}	-0.376 ± 0.039
b_{27}	1.554 ± 0.047

Pion-Zerfallskonstante

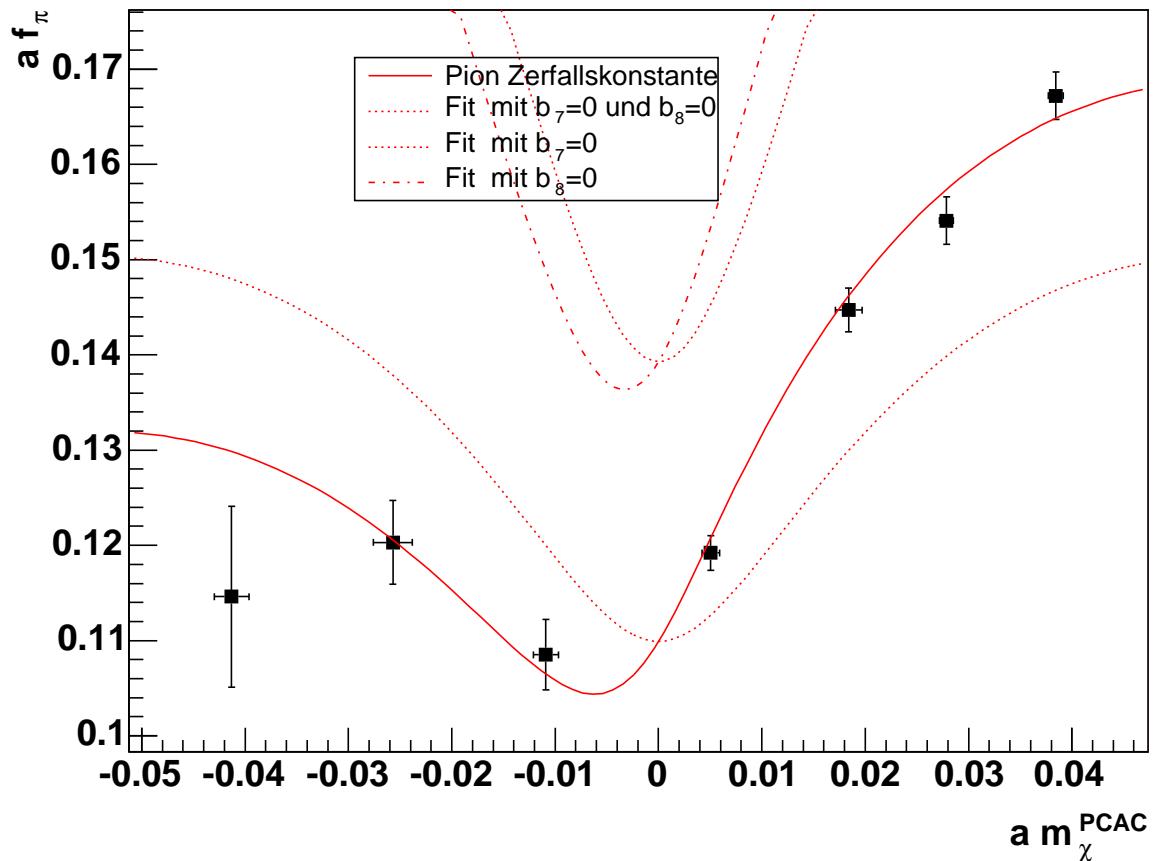


Abbildung 3.21: Fit Pion-Zerfallskonstante ($f_1+f_2+f_3+f_7$)

$$\begin{aligned}
 a f_{\pi, lattice} &= b_5 - b_6 \overline{\chi}' \ln \overline{\chi}' + b_7 \frac{a m_\chi^{PCAC}}{\overline{\chi}'} + b_8 \overline{\chi}' \\
 \overline{\chi}' &\equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, lattice}^{PCAC}\right)^2 + b_1}
 \end{aligned}$$

$$b_1 = \frac{0.0001}{Z_A^2} = \frac{(a\mu)^2}{Z_A^2} = 0.0001104$$

	Fitparameter
b_2	7.02 ± 0.15
b_3	-51.8 ± 5.5
b_4	0.15 ± 0.11
b_5	0.0687 ± 0.0092
b_6	1.48 ± 0.39
b_7	0.0187 ± 0.0015
b_8	-2.8 ± 1.1
b_9	0.348 ± 0.019
b_{10}	1.5 ± 1.0
b_{11}	-0.0143 ± 0.0063
b_{12}	-1.5 ± 2.8
b_{14}	-1.00288 ± 0.00019
b_{26}	-0.376 ± 0.039
b_{27}	1.554 ± 0.047

Pseudoskalares Matrixelement

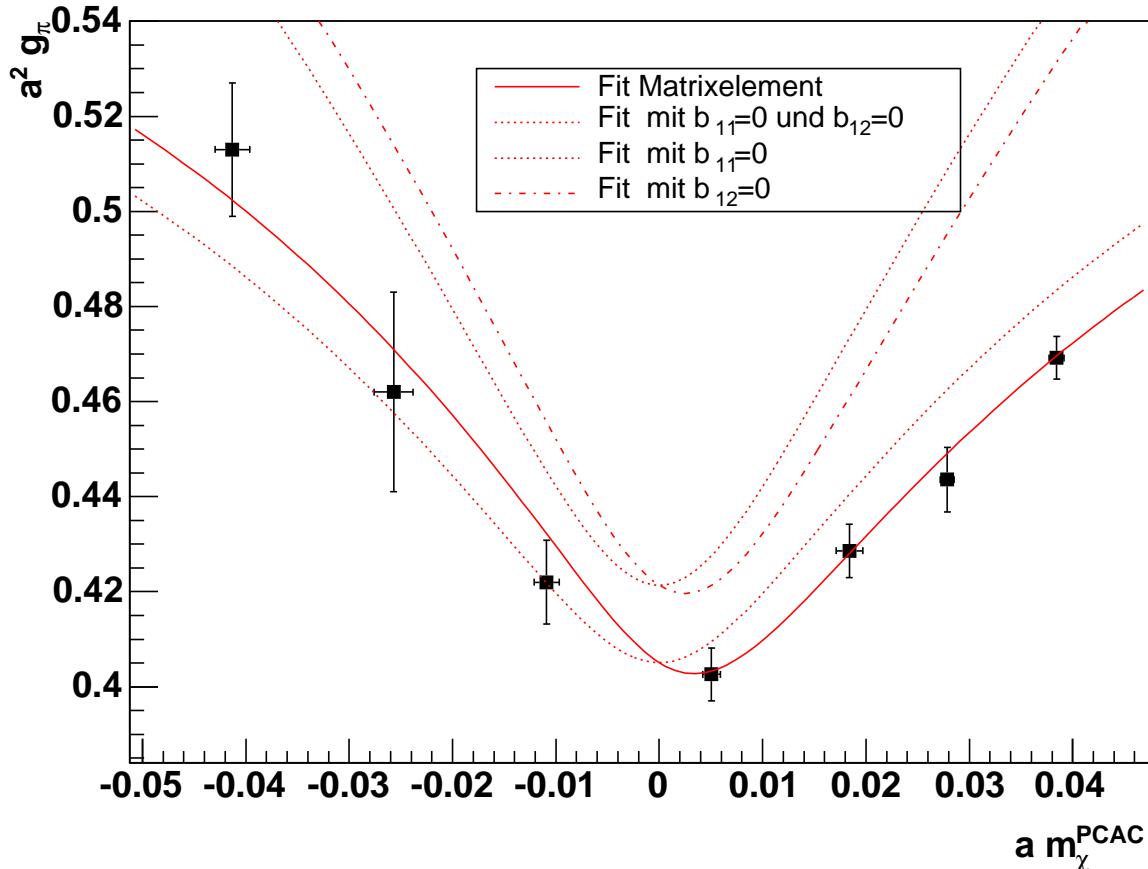


Abbildung 3.22: Fit pseudoskalares Matrixelement ($f_1+f_2+f_3+f_7$)

$$a^2 g_{\pi, \text{lattice}} = b_9 - b_{10} \bar{\chi}' \ln \bar{\chi}' + b_{11} \frac{a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}'} + b_{12} \bar{\chi}'$$

$$\bar{\chi}' \equiv \sqrt{\left(a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}\right)^2 + b_1}$$

$$b_1 = \frac{0.0001}{Z_A^2} = \frac{(a\mu)^2}{Z_A^2} = 0.0001104$$

	Fitparameter
b_2	7.02 ± 0.15
b_3	-51.8 ± 5.5
b_4	0.15 ± 0.11
b_5	0.0687 ± 0.0092
b_6	1.48 ± 0.39
b_7	0.0187 ± 0.0015
b_8	-2.8 ± 1.1
b_9	0.348 ± 0.019
b_{10}	1.5 ± 1.0
b_{11}	-0.0143 ± 0.0063
b_{12}	-1.5 ± 2.8
b_{14}	-1.00288 ± 0.00019
b_{26}	-0.376 ± 0.039
b_{27}	1.554 ± 0.047

PCAC-Quark-Masse

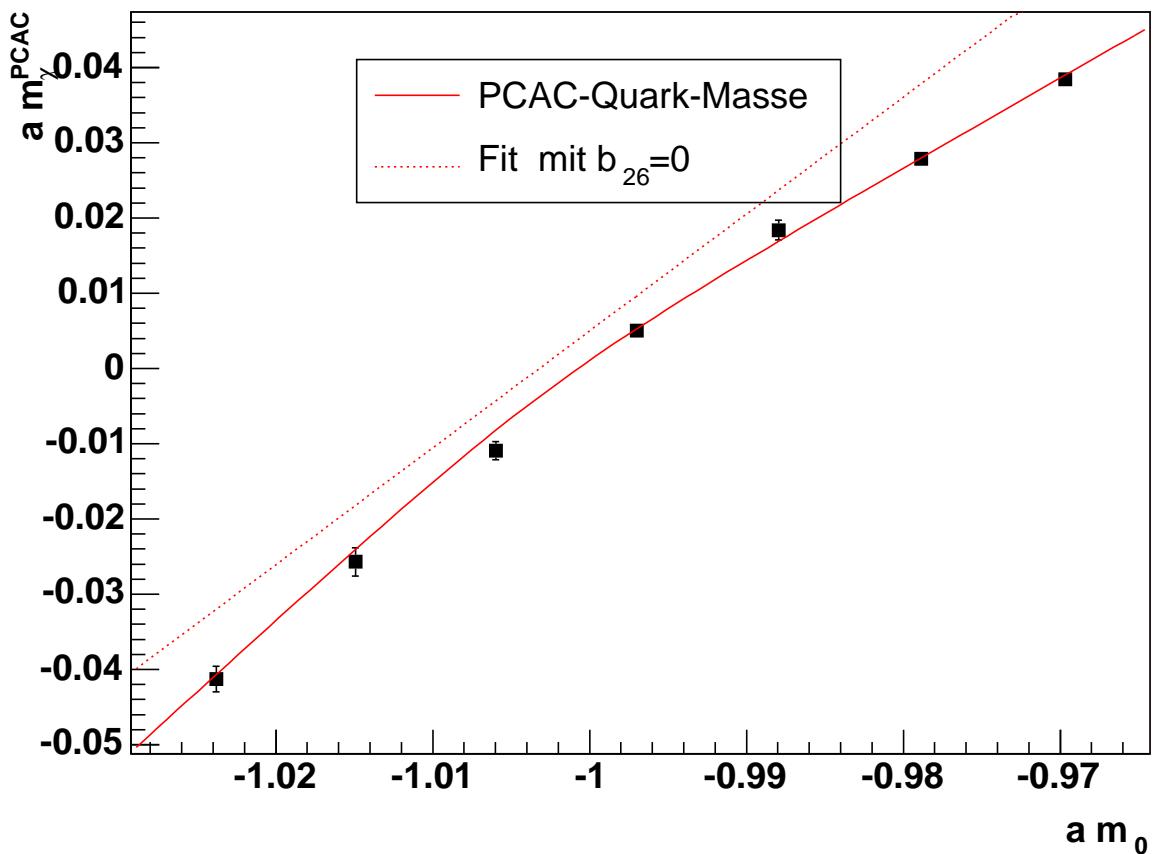


Abbildung 3.23: Fit PCAC-Quark-Masse ($f_1 + f_2 + f_3 + f_7$)

$$a m_{PCAC} = b_{27} a m'_0 + b_{26} \sqrt{(a m'_0)^2 + b_{15}}$$

	Fitparameter
b_2	7.02 ± 0.15
b_3	-51.8 ± 5.5
b_4	0.15 ± 0.11
b_5	0.0687 ± 0.0092
b_6	1.48 ± 0.39
b_7	0.0187 ± 0.0015
b_8	-2.8 ± 1.1
b_9	0.348 ± 0.019
b_{10}	1.5 ± 1.0
b_{11}	-0.0143 ± 0.0063
b_{12}	-1.5 ± 2.8
b_{14}	-1.00288 ± 0.00019
b_{26}	-0.376 ± 0.039
b_{27}	1.554 ± 0.047

3.7 Fit mit physikalischen Parametern

Bisher wurden die Fits immer mit einem Satz von Fit-Parametern b_i durchgeführt, der noch erhebliche Redundanzen enthielt. Hierdurch kann es bei der Regressionsanalyse zu Kompen-sationseffekten der Parameter untereinander kommen. Das Ergebnis einer solchen Kompen-sation sind falsche Vorhersagen für die Werte der Niederenergie-Koeffizienten der Chiralen Störungstheorie.

Um dies vollständig auszuschließen kann man versuchen, einen Fit mit den physikalischen Parametern der Chiralen Störungstheorie wie beispielsweise B_0 , F_0 oder L_{86} durchzuführen. Dies ist aber mit teilweise erheblichen technischen Komplikationen verbunden, da die Modellfunktionen nun in der Regel auch Produkte wie $B_0 L_{86}$ oder Quotienten wie $\frac{L_{86}}{F_0}$ enthalten. Problematisch ist hier die Tatsache, dass im Laufe der numerischen Minimierung des „Maximum-Likelyhood-Estimators“ \mathcal{L} zwar die Produkte gegen einen konstanten Wert konvergieren, die Parameter selbst aber weit auseinander driften. Dieser Effekt ist immer dann zu beobachten wenn in den Modellfunktionen zu viele Parameter berücksichtigt werden. Diese sind dann in der Regel nicht mehr ausreichend durch die konkrete Beschaffenheit der Daten, dass heißt durch den speziellen Kurvenverlauf, fixiert.

Aus diesem Grund ist es nicht sinnvoll, nur eine einzige Observable, wie beispielsweise die Pion-Masse, allein zu fitten. In diesem Fall sind die Parameter nicht ausreichend fixiert und die Regressionsanalyse verliert ihre Aussagekraft. Im folgenden werden also für jeden Datensatz, also ein bestimmtes μ und ein fixiertes β , immer sämtliche Observable gleichzeitig berücksichtigt.

Um einen einfachen Vergleich der Ergebnisse dieser Fits auch mit früheren Rechnungen zu ermöglichen, bietet es sich an, die universellen Niederenergie-Skalen Λ_3 und Λ_4 [21, 20] einzuführen über :

$$\Lambda_3 = 4\pi F_0 e^{-\alpha_{6845}}, \quad \alpha_{6845} = 128\pi^2 (2L_{86}^r - L_{54}^r) \quad (3.191)$$

$$\Lambda_4 = 4\pi F_0 e^{-\alpha_{45}/4}, \quad \alpha_{45} = 128\pi^2 L_{54}^r \quad (3.192)$$

Um die Qualität der Approximation der Simulationsdaten durch die Gleichungen der Chiralen Störungstheorie genau quantifizieren zu können, wird bei jedem Fit zusätzlich das Least-Squares-Minimum

$$\Delta \equiv \mathcal{L}_{min}^{GNLS} \quad (3.193)$$

angegeben.

Ebenso wie bisher, basieren alle der im folgenden dargestellten Analysen auf dem Datensatz, der mir von F. Farchioni zur Verfügung gestellt worden ist. Im Anhang F ist der Original Da-tensatz abgedruckt, aus dem sich sämtliche Angaben zum Setup der einzelnen Simulationen entnehmen lassen.

Hier noch eine kurze Übersicht der verwendeten Modellfunktionen und Renormierungsfak-to-re :

Gitter-Größen	renormierte Größen
$m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}$	$m_{\chi}^{\text{PCAC}} = \frac{Z_A}{Z_P} m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}$
μ_{lattice}	$\mu = \frac{1}{Z_P} \mu_{\text{lattice}}$
$f_{\pi, \text{lattice}} \equiv f_{\pi}^{(V_c)}$	$f_{\pi} = f_{\pi, \text{lattice}}$
$g_{\pi, \text{lattice}}$	$g_{\pi} = Z_P g_{\pi, \text{lattice}}$

Tabelle 3.2: Renormierungsfaktoren

Eine Zusammenfassung, aller für die hier durchgeführten Simulationen relevanten Beziehungen, wurde von I. Wetzorke erstellt und ist im Original in Anhang E zu finden. Die für die Analysen verwendeten Modellfunktionen bis $\mathcal{O}(a)$ lauten :

$$\bar{\chi} = 2B \frac{1}{a} \sqrt{\left(a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}\right)^2 + \left(\frac{a \mu_{\text{lattice}}}{Z_A}\right)^2} \quad \text{und} \quad B \equiv B_0 \frac{Z_A}{Z_P}$$

$$\chi'_0 = 2B_0 (m_0 - m_c) \quad \text{und} \quad a m_0 = \frac{1}{2\kappa} - 4$$

$$\begin{aligned} m_{\pi\pm}^2 &= \bar{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi}^2 \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \bar{\chi}^2 \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \chi'_{\text{PCAC}} \rho \\ &= \bar{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi}^2 \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \bar{\chi}^2 \\ &\quad + \frac{8}{F_0^2} (W - \tilde{W}) \chi'_{\text{PCAC}} \rho \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{f_{\pi}}{F_0} &= 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \left\{ L_{54} \bar{\chi} + (-L_{54} + W_{54}) \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}} \right\} \\ &= 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \left\{ L_{54} \bar{\chi} + \tilde{W} \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{g_{\pi}}{F_0 B_0} &= 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) \bar{\chi} \\ &\quad + \frac{4}{F_0^2} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}} \\ &= 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) \bar{\chi} \\ &\quad + \frac{4}{F_0^2} (2W - \tilde{W}) \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}} \end{aligned}$$

$$2B_0 m_\chi^{PCAC} = \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86})$$

Zunächst wird der Renormierungsfaktor Z_A während der Minimierung von \mathcal{L}^{GNLS} auf den Wert fixiert, der sich direkt aus den Monte-Carlo-Daten ergibt. Da Z_A allerdings eine gewisse β -Abhängigkeit zeigt, wird mit folgender Konvention gearbeitet :

$$Z_A = 0,952 \pm 0,030 \quad \text{für } \beta = 0.67 \quad (3.194)$$

$$Z'_A = 0,944 \pm 0,074 \quad \text{für } \beta = 0.74 \quad (3.195)$$

3.7.1 Größe der Gitterkonstante a

Ganz wesentlich für die korrekte Skalierung der Fit-Ergebnisse ist es, in den Gleichungen der Chiralen Störungstheorie, einen möglichst präzisen Wert für die Gitterkonstante a zu verwenden. Da sich der genaue Wert für a aber erst aus den Ergebnissen der Gitter-QCD Simulationen ergibt, ist es notwendig, ein verlässliches Verfahren zur Bestimmung der Gitterkonstanten zu finden. Führt man nun eine Full-Twist Extrapolation zu $\omega = \frac{\pi}{2}$ der Werte von r_0/a durch, so lässt sich aus diesem Ergebnis zusammen mit der Kenntnis der Sommer-Skala $r_0 \equiv 0.5 \text{ fm} = (394.654 \text{ MeV})^{-1}$ die Größe des Gitterabstands bestimmen. Bei dieser Extrapolation ergibt sich für r_0/a jedoch das Problem, dass das Ergebnis davon abhängt, ob man sich von der Seite positiver oder negativer Quark-Massen der Phasenübergangslinie nähert. Dies macht es nun nötig, die Resultate geeignet zu interpolieren, was von F. Farchioni durchgeführt wurde und folgende Ergebnisse liefert :

	$\beta = 0.67$		$\beta = 0.74$	
	$m_q > 0$	Mittelwert	$m_q > 0$	Mittelwert
r_0/a	2.680 ± 0.068	2.845 ± 0.068	4.11 ± 0.13	3.77 ± 0.21
a	0.1866 ± 0.0046	0.1757 ± 0.0044	0.1216 ± 0.0039	0.1326 ± 0.0072

Bei einem Fit, in dem sowohl positive als auch negative Werte der Quark-Masse berücksichtigt werden, ist es also am günstigsten, mit den oben angegebenen Mittelwerten zu arbeiten. Ist man jedoch an einer Analyse interessiert, in der die Datenpunkte bei negativer Masse nicht verwendet werden, ist es sinnvoller, statt dessen mit dem Wert für a bei $m_q > 0$ zu arbeiten. Eines der Ziele dieser Fits ist es nämlich gerade, die Konsistenz der oben getroffenen Wahl von a zu überprüfen, weshalb es sich anbietet, auf diese Weise beide Ansätze miteinander zu vergleichen.

3.7.2 Fit für $\beta = 0,67$ und $\mu = 0,01$ mit m_χ^{PCAC}

Wertet man den gemeinsamen Fit aller vier Observablen aus, so stellt man unmittelbar fest, dass insbesondere der Fit für die PCAC-Quark-Masse die Daten nur sehr schlecht repräsentiert. Offenbar liefern hier die im Fit nicht berücksichtigten Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ einen wesentlichen Beitrag zum Ergebnis. Als Folge der Problematik mit der PCAC-Quark-Masse nehmen nun auch die anderen Fit-Parameter nicht die korrekten Werte an. Dies kann man vor allem an dem Resultat für die Pion-Masse erkennen, wo der systematische Fehler sofort erkennbar ist.

Überraschend ist dieses Ergebnis allerdings nicht. Bereits in früheren Arbeiten [28] wurde festgestellt, dass bei Betrachtung der Observablen als Funktionen der nackten Quark-Masse die Gitter-Effekte eine sehr große Rolle spielen. Deshalb ist es auch an dieser Stelle zu erwarten gewesen, dass im Fall der PCAC-Quark-Masse, die ja gegen $a m_0$ aufgetragen wird, dieser Effekt zu beobachten ist.

Dagegen ist genauso wie in [28] zu beobachten, dass es im Hinblick auf die Größe der Gitter-Artefakte günstig ist, die Observablen statt gegen $a m_0$ nun gegen die PCAC-Quark-Masse aufzutragen. Mit diesem Thema beschäftigt sich dann auch der nächste Abschnitt.

	Dimensionslose Parameter
am_c	-0.996302 ± 0.000065
L_{54}	-0.00043 ± 0.00037
L_{86}	0.000348 ± 0.000068
α_{45}	-0.54 ± 0.47
α_{6845}	1.42 ± 0.50
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	3.0 ± 1.5
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	11.0 ± 1.3
Δ	1084 ± 81

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.463 ± 0.022	91.4 ± 4.4
B	18.6 ± 1.6	3660 ± 320
$W W_0$	0.00099 ± 0.00012	7570 ± 960
$\tilde{W} W_0$	0.0112 ± 0.0019	86000 ± 15000

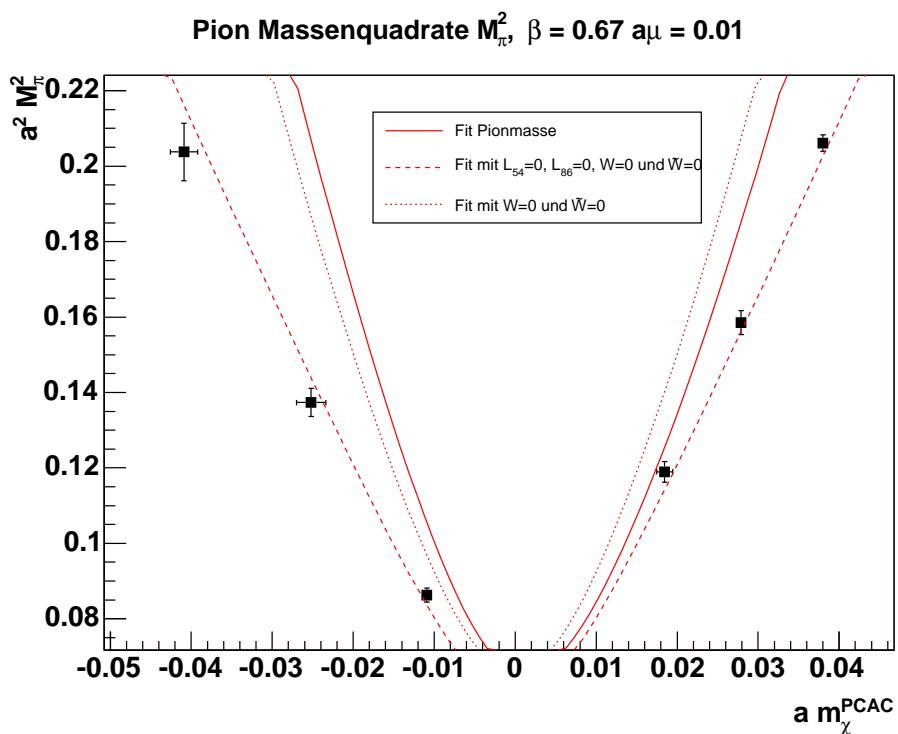


Abbildung 3.24: Fit Pion-Massenquadrat

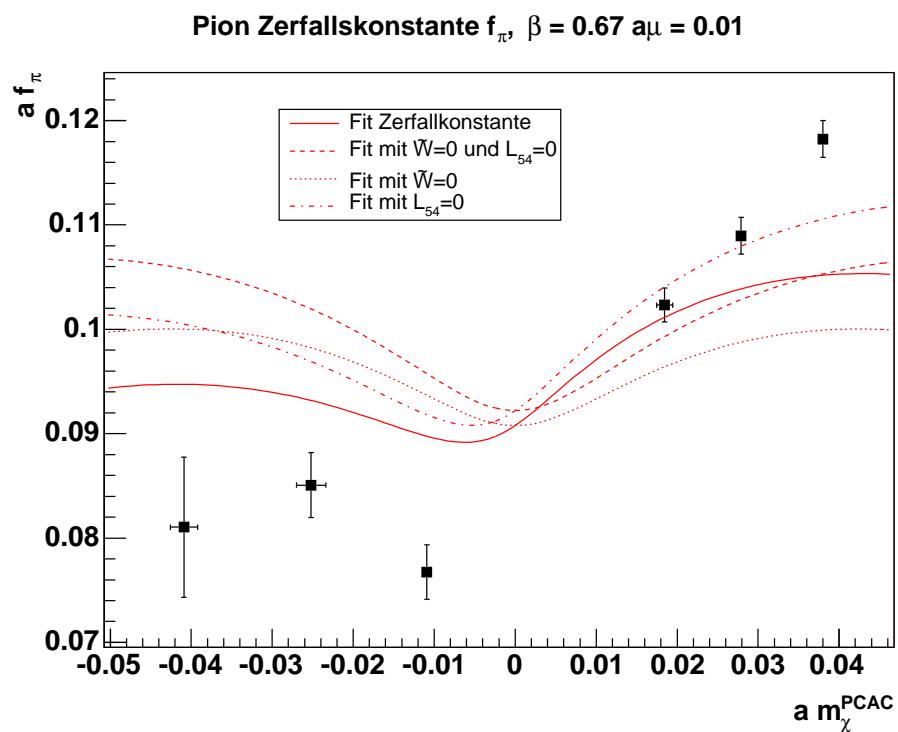


Abbildung 3.25: Fit Pion-Zerfallskonstante

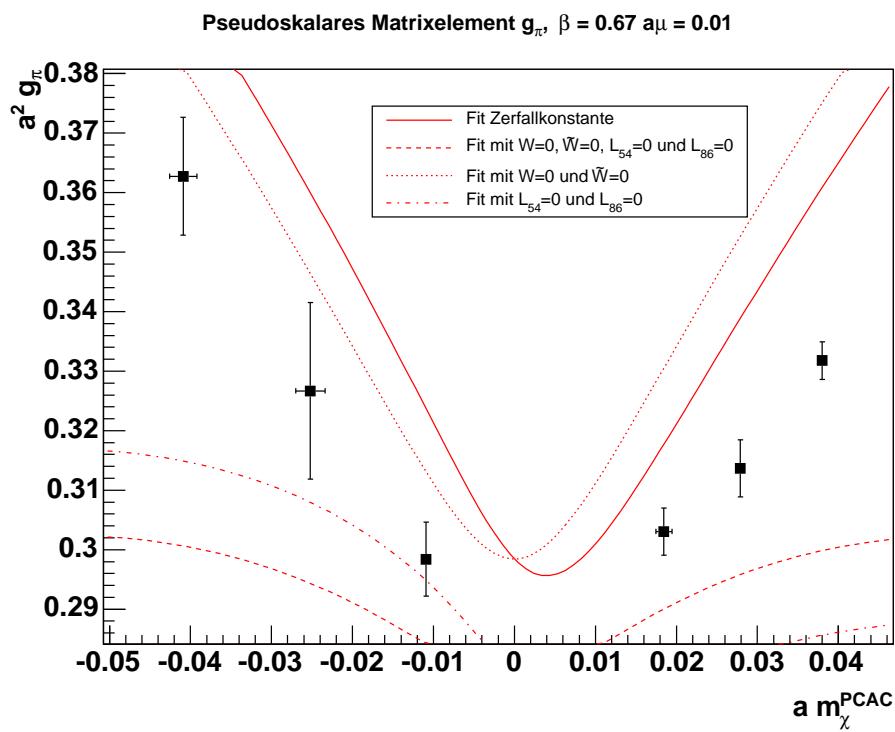


Abbildung 3.26: Fit pseudoskalares Matrixelement

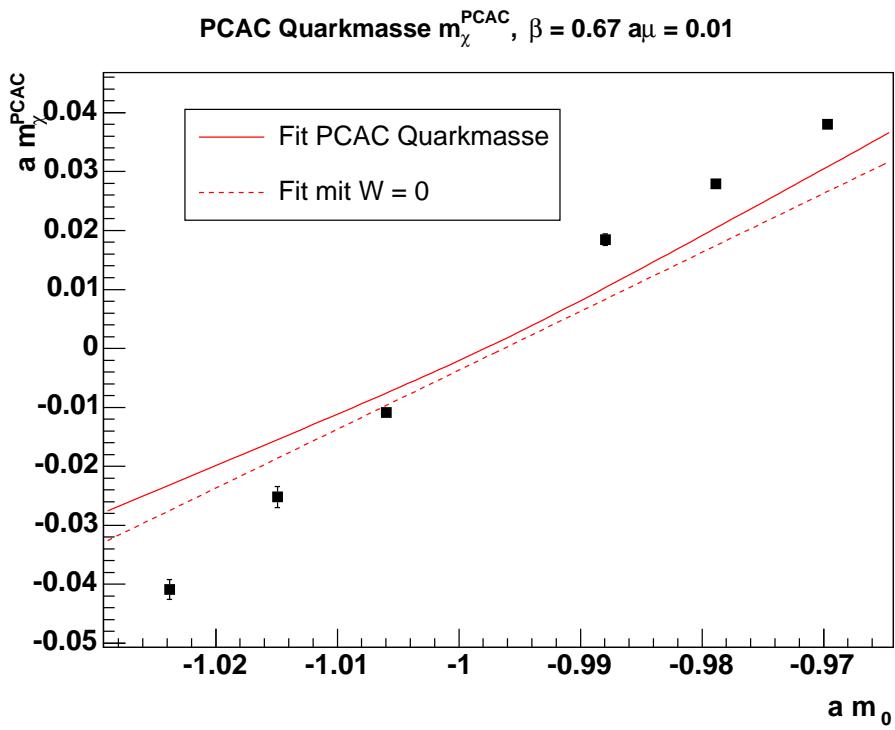


Abbildung 3.27: Fit PCAC-Quark-Masse

3.7.3 Fit für $\beta = 0,67$ und $\mu = 0,01$

Wie sich im letzten Abschnitt gezeigt hat, sind bei Auftragung der Observablen gegen die nackte Quark-Masse $a m_0$ die Diskretisierungsartefakte nicht mehr als klein anzusehen. Damit ist bis zur Ordnung $\mathcal{O}(a)$ ein gemeinsamer Fit aller vier Messgrößen nicht sinnvoll.

An den hier dargestellten Resultaten des Fits lässt sich sofort erkennen, dass die Simulationsdaten nun deutlich besser durch die Modellfunktionen dargestellt werden.

Der Grund, weshalb ein gemeinsamer Fit zusammen mit der PCAC-Quark-Masse ursprünglich angestrebt wurde, war eine Steigerung der Präzision der Analyse. Wie sich nun zeigt, ist dieses Ziel aber nicht erreichbar, da die Einbeziehung von $a m_\chi^{PCAC}$ in die Fits die Unsicherheiten der Ergebnisse drastisch erhöht. Besonders problematisch sind diese Unsicherheiten, da sie sich als systematische Abweichungen nicht in einer Modifikation der Fehler der Fit-Parameter niederschlagen. Die Fehlerbereiche sind im wesentlichen genauso groß, wie ohne Berücksichtigung der PCAC-Quark-Masse, obwohl die Werte selbst deutliche Abweichungen zeigen.

In den folgenden Analysen wird also die PCAC-Quark-Masse nicht mehr berücksichtigt, da dies zu massiven und schwer abschätzbar systematischen Fehlern führen würde.

Neben der Untersuchung der Problematik im Zusammenhang mit der nackten Gitter-Quark-Masse dient dieser Fit aber vor allem dazu, zu überprüfen, ob die Gleichungen der Chiralen Störungstheorie bis $\mathcal{O}(a)$ die vorliegenden Simulationsdaten angemessen beschreiben können. Wie sich bei Betrachtung der folgenden Abbildungen zeigt, ist dies aber tatsächlich gut erfüllt.

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00046 ± 0.00016
L_{86}	0.000348 ± 0.000083
α_{45}	0.59 ± 0.20
α_{6845}	0.29 ± 0.29
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	9.4 ± 2.8
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	14.55 ± 0.75
Δ	102 ± 24

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.381 ± 0.023	75.3 ± 4.6
B	18.4 ± 1.3	3630 ± 260
$W W_0$	0.0039 ± 0.0017	30000 ± 14000
$\tilde{W} W_0$	0.0069 ± 0.0025	53000 ± 20000

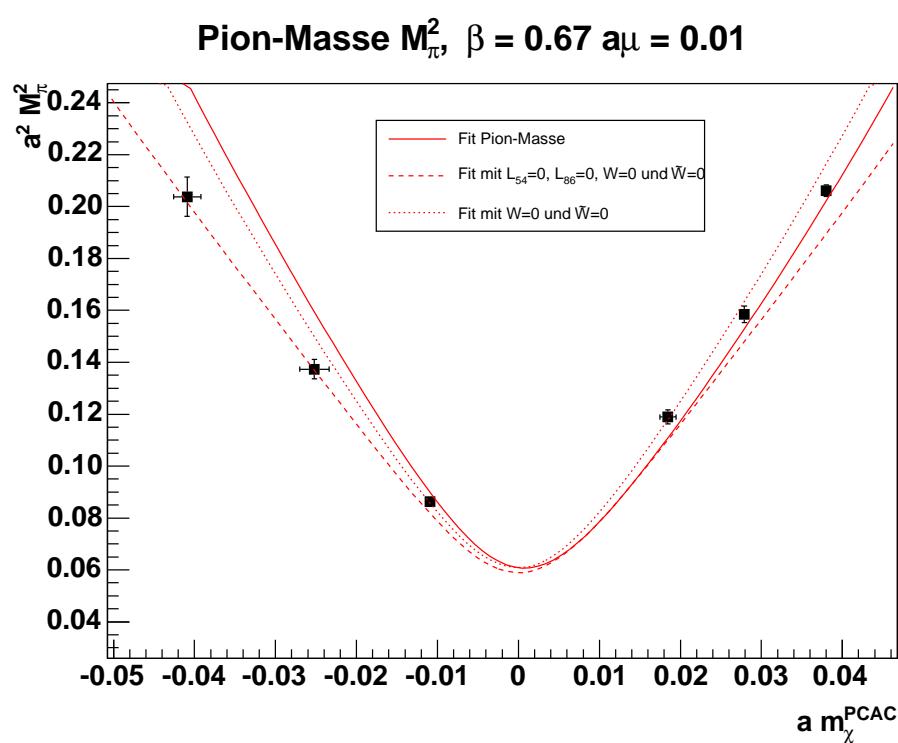


Abbildung 3.28: Fit Pion-Massenquadrate

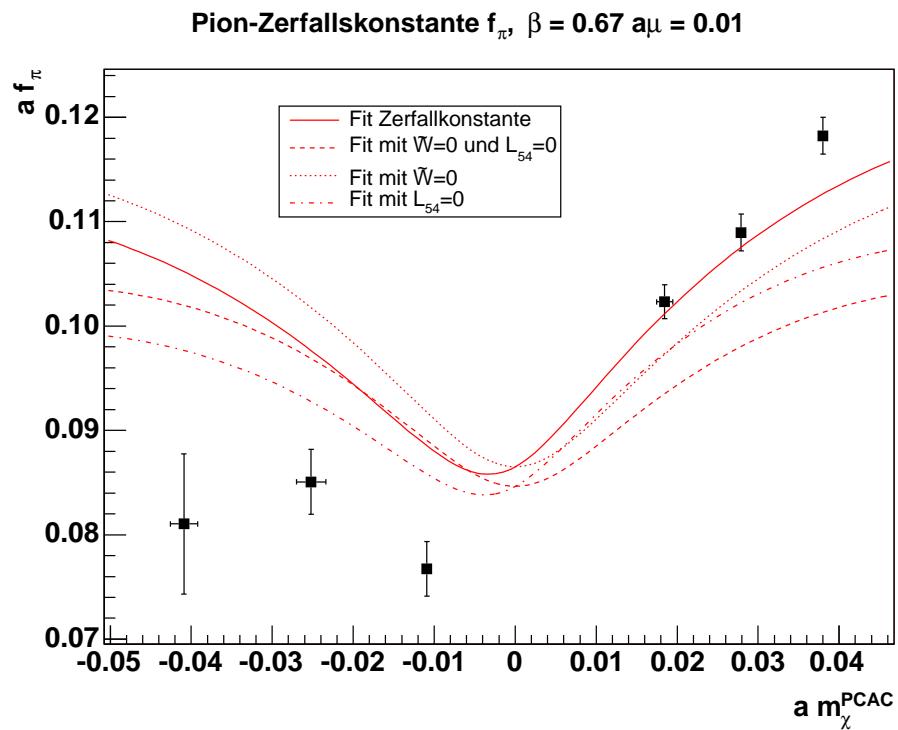


Abbildung 3.29: Fit Pion-Zerfallskonstante

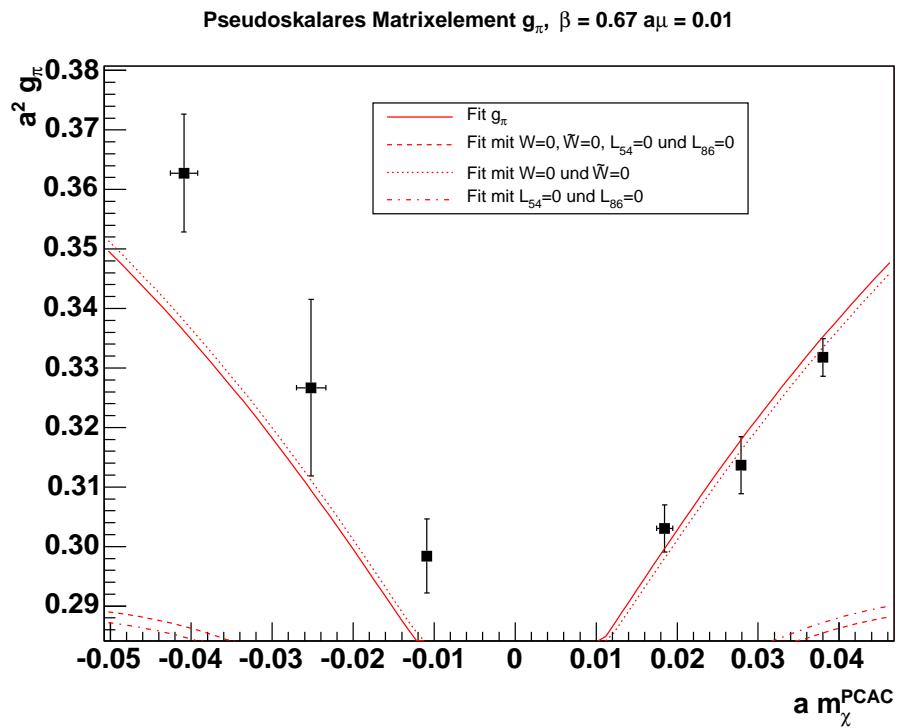


Abbildung 3.30: Fit pseudoskalares Matrixelement

3.7.4 Fit für $\beta = 0,67$ mit $\mu = 0,01$ und $\mu = 0$

Nun kann man aber auch noch die Daten für $\mu = 0$ berücksichtigen und erhält damit ein deutlich zuverlässigeres Resultat für die Fit-Parameter. Vergleicht man diese Ergebnisse mit denen ohne $\mu = 0$, so ist festzustellen, dass sich nur kleine Abweichungen der Werte der Parameter ergeben. Außerdem werden die Simulationsdaten auch hier gut durch die Gleichungen der Chiralen Störungstheorie beschrieben. Dies ist ein deutlicher Hinweis darauf, dass die Analysen in sich konsistent sind.

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00098 ± 0.00026
L_{86}	0.00078 ± 0.00013
α_{45}	1.23 ± 0.32
α_{6845}	0.73 ± 0.47
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	6.1 ± 2.8
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	17.1 ± 1.4
Δ	268 ± 74

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.409 ± 0.018	80.7 ± 3.6
B	16.21 ± 0.64	3200 ± 130
$W W_0$	0.0066 ± 0.0019	50000 ± 15000
$\tilde{W} W_0$	0.0116 ± 0.0024	89000 ± 19000

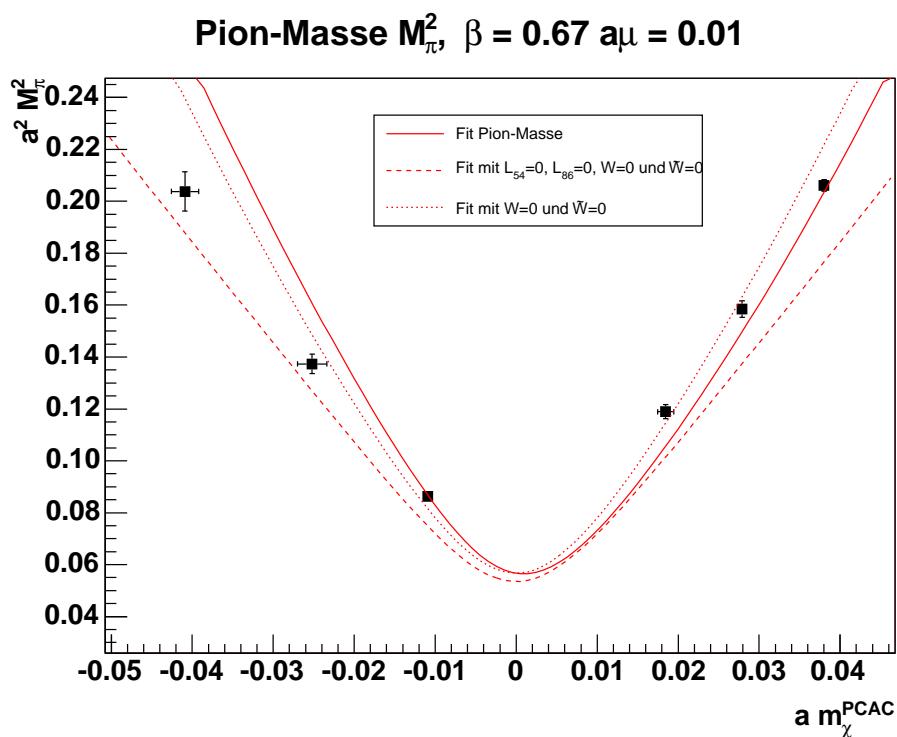


Abbildung 3.31: Fit Pion-Massenquadrat

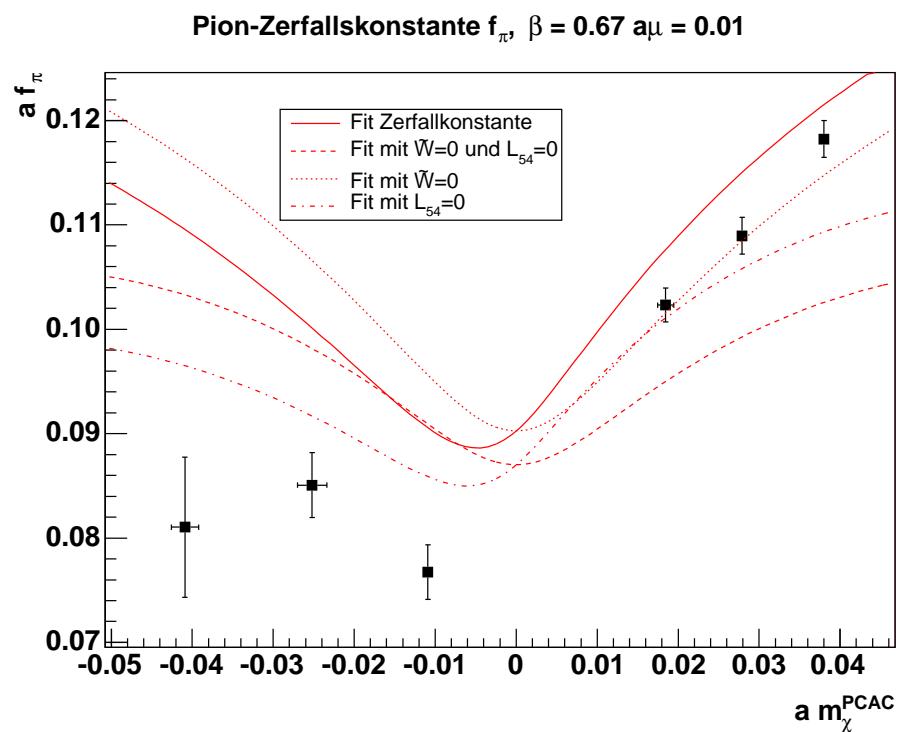


Abbildung 3.32: Fit Pion-Zerfallskonstante

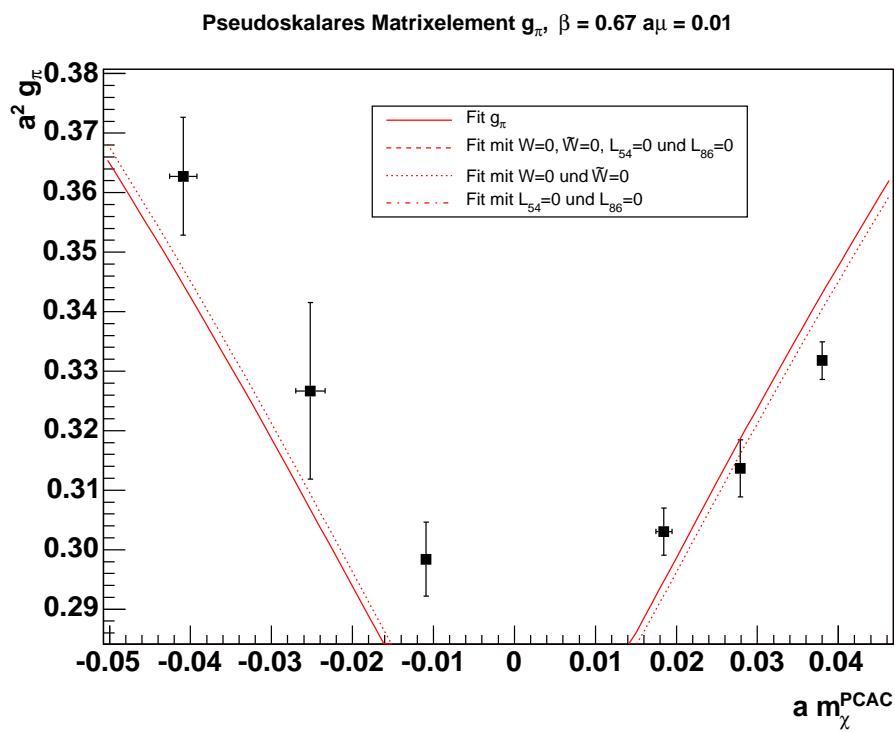


Abbildung 3.33: Fit pseudoskalares Matrixelement

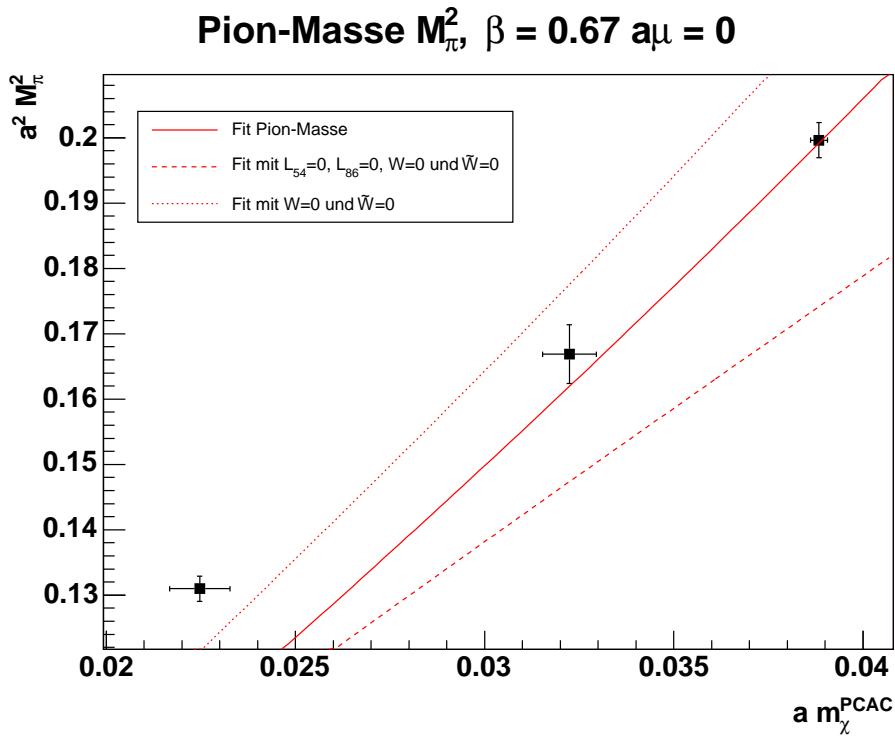


Abbildung 3.34: Fit Pion-Massenquadrate

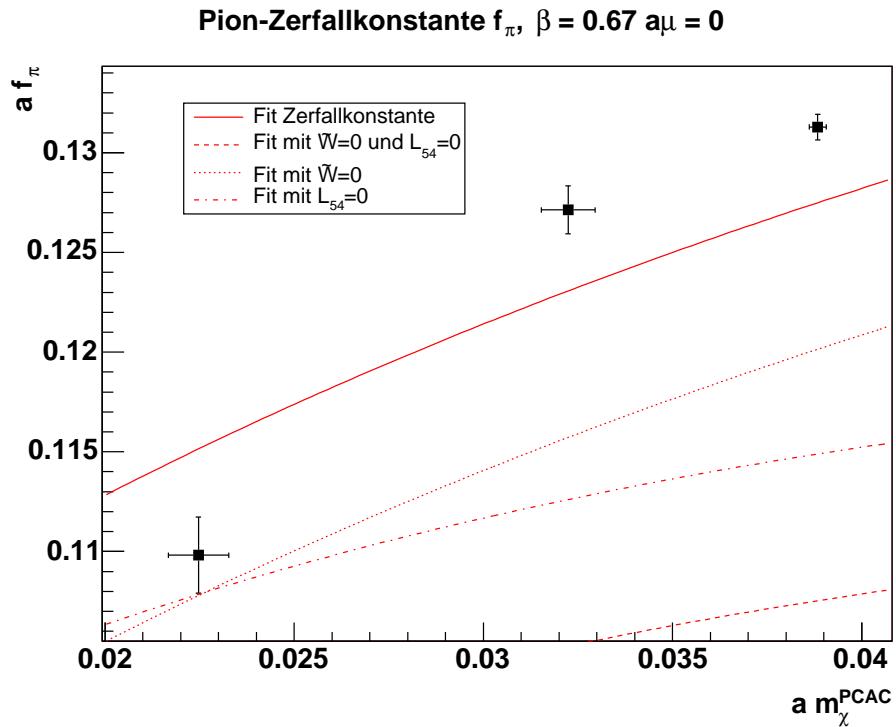


Abbildung 3.35: Fit Pion-Zerfallskonstante

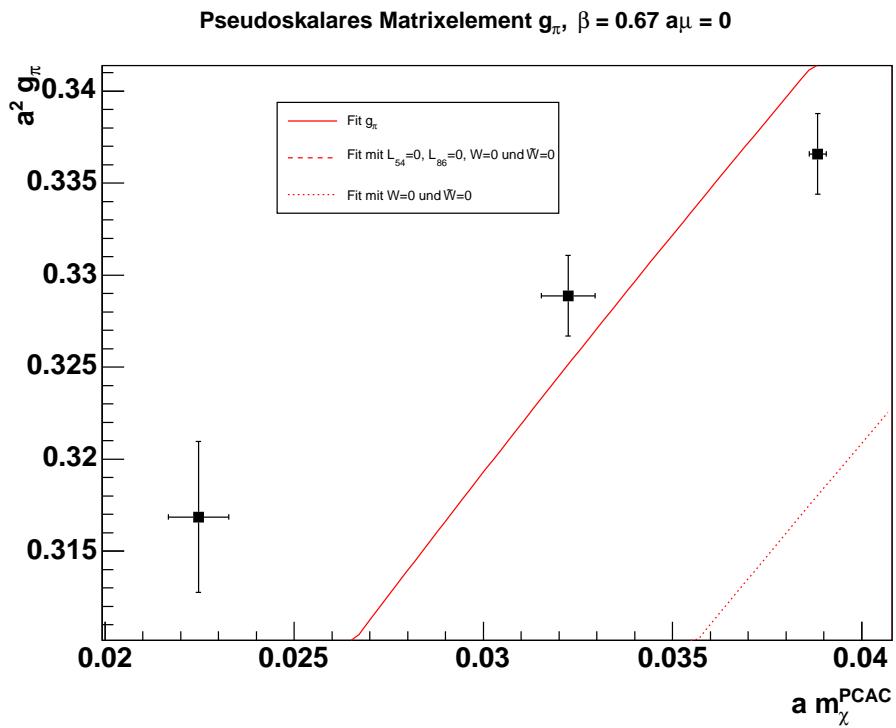


Abbildung 3.36: Fit pseudoskalares Matrixelement

3.7.5 Fit für $\beta = 0,74$ und $\mu = 0,0075$

Genauso wie im Fall für $\beta = 0,67$ kann man auch hier verfahren. Vergleicht man nun die Ergebnisse für beide β -Werte miteinander, so kann man erste Aussagen darüber machen, ob man sich mit den unterschiedlichen Simulationen bereits im Scaling-Bereich der Chiralen Störungstheorie befindet. Aufgrund der β -Abhängigkeit der in die Definition von B eingehenden Renormierungsfaktoren, muss man für $\beta = 0.74$, an Stelle von B , mit einer neuen Größe arbeiten, die hier mit B' bezeichnet wird. Da die β -Abhängigkeit der Renormierungsfaktoren jedoch nur schwach ist, unterscheiden sich die numerischen Werte von B und B' nur geringfügig.

Im wesentlichen liefern die beiden Fits bei unterschiedlichen β -Werten jedoch vergleichbare Resultate, so dass es sinnvoll erscheint, einen gemeinsamen Fit der beiden Datensätze durchzuführen.

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.0009 ± 0.0013
L_{86}	0.0007 ± 0.0013
α_{45}	1.1 ± 1.6
α_{6845}	0.6 ± 3.6
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	7 ± 24
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	16.5 ± 6.8
Δ	90 ± 220

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.306 ± 0.038	60.4 ± 7.6
B'	17.9 ± 2.8	3540 ± 560
$W W_0$	-0.006 ± 0.069	-40000 ± 550000
$\tilde{W} W_0$	-0.003 ± 0.035	-20000 ± 280000

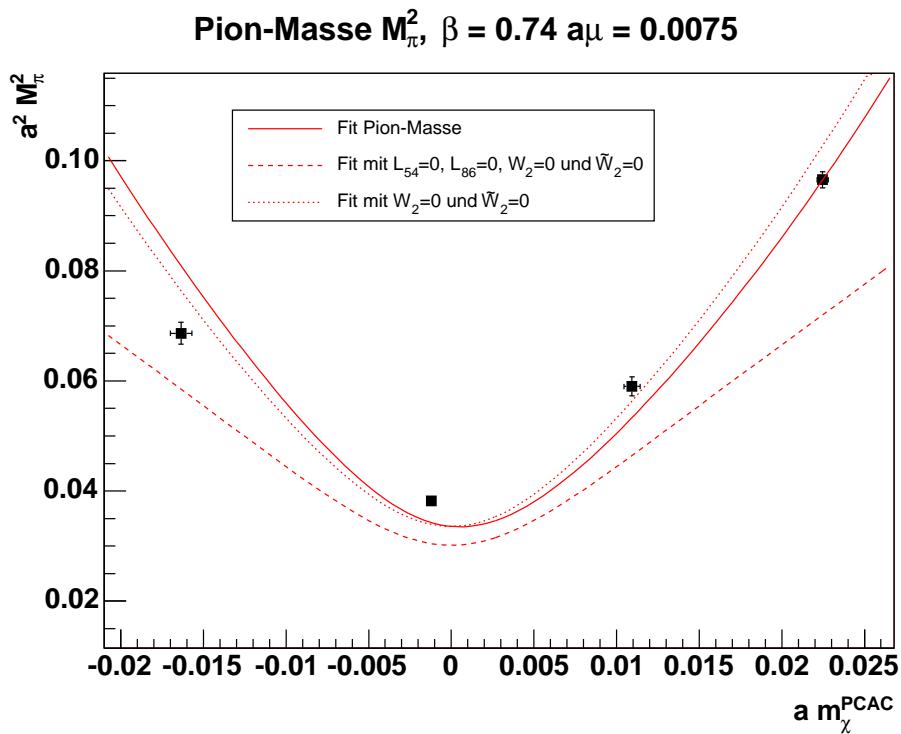


Abbildung 3.37: Fit Pion-Massenquadrat

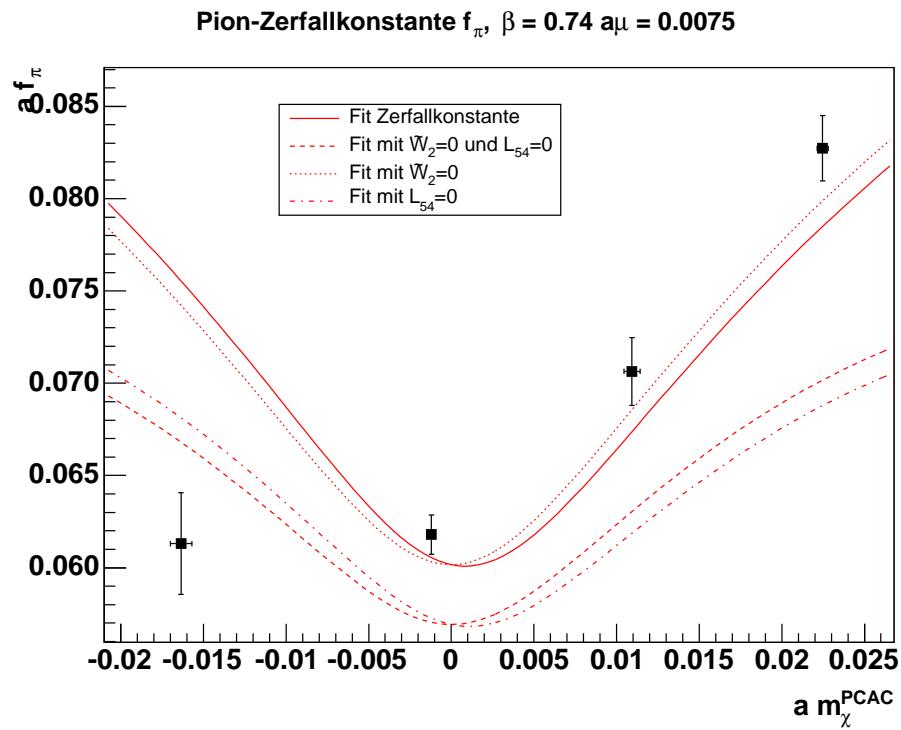


Abbildung 3.38: Fit Pion-Zerfallskonstante

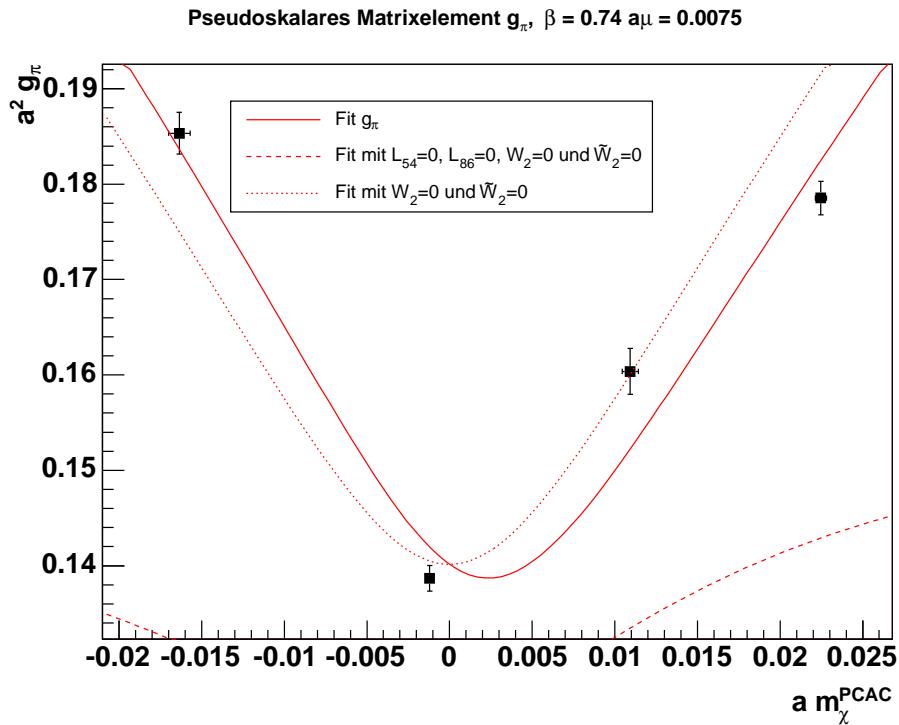


Abbildung 3.39: Fit pseudoskalares Matrixelement

3.7.6 Fit für $\beta = 0,74$ mit $\mu = 0,0075$ und $\mu = 0$

Nun kann man aber auch noch die Daten für $\mu = 0$ berücksichtigen und erhält :

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00096 ± 0.00026
L_{86}	0.00081 ± 0.00011
α_{45}	1.22 ± 0.33
α_{6845}	0.83 ± 0.43
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	5.5 ± 2.3
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	17.0 ± 1.4
Δ	148 ± 59

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.347 ± 0.026	68.6 ± 5.2
B'	16.8 ± 1.5	3310 ± 300
$W W_0$	-0.0027 ± 0.0020	-21000 ± 16000
$\tilde{W} W_0$	0.0027 ± 0.0048	21000 ± 38000

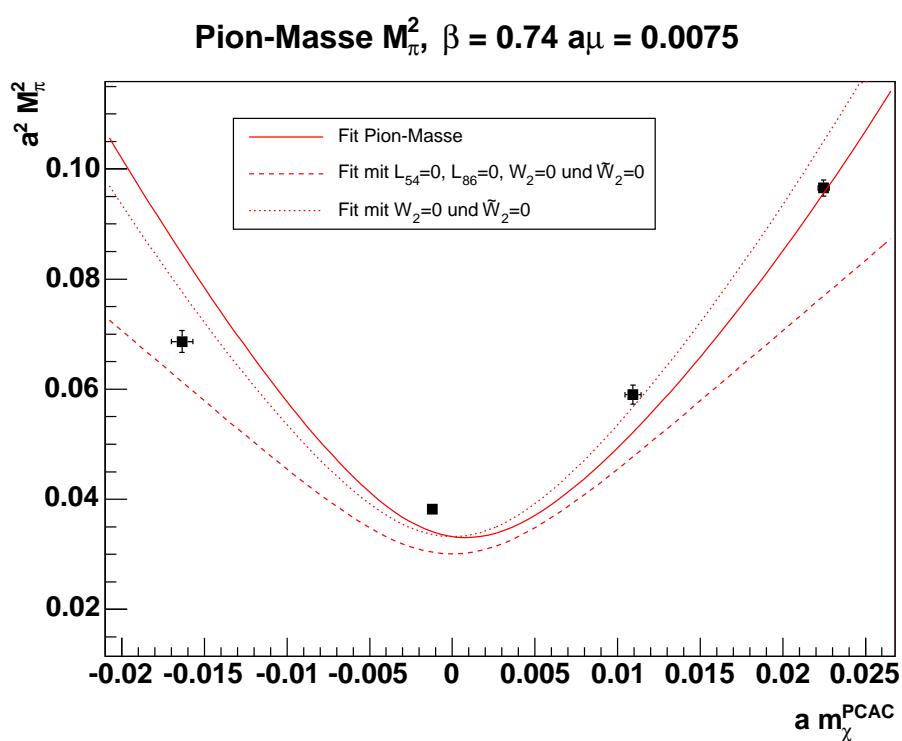


Abbildung 3.40: Fit Pion-Massenquadrate

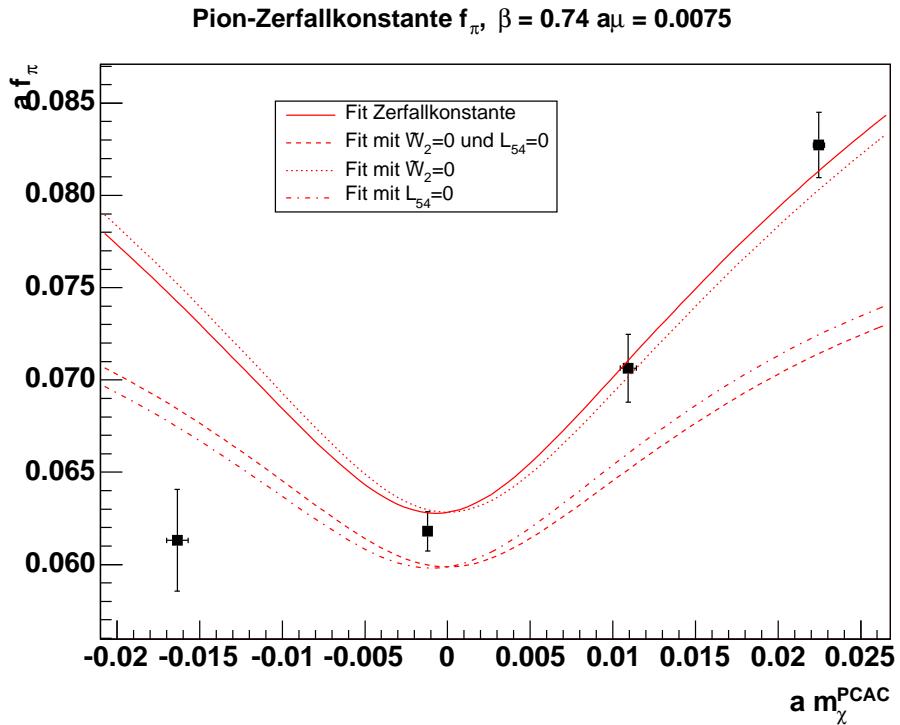


Abbildung 3.41: Fit Pion-Zerfallskonstante

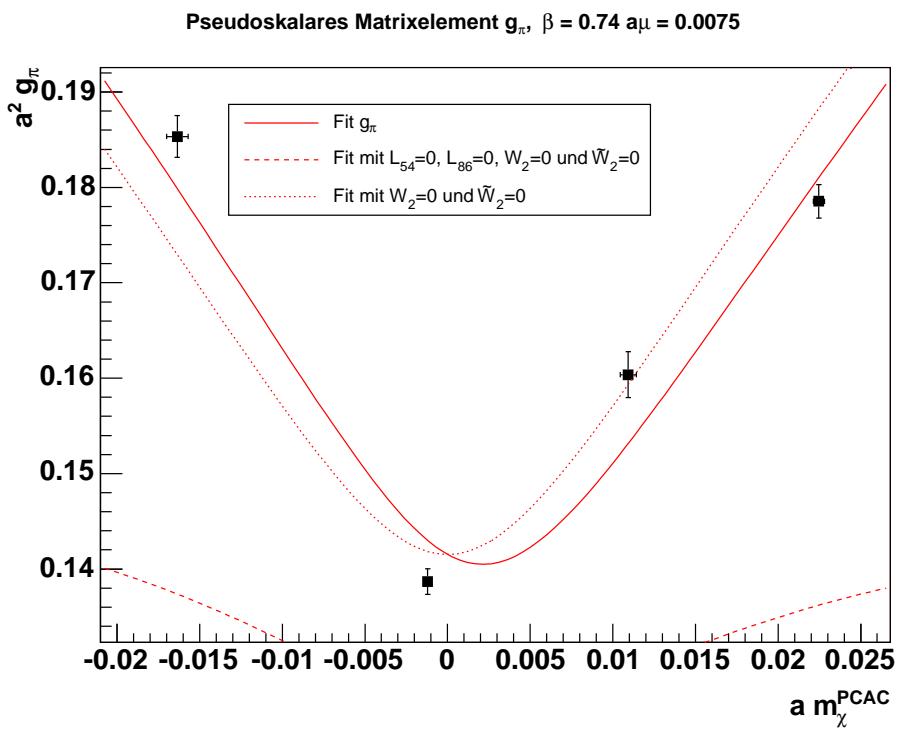


Abbildung 3.42: Fit pseudoskalares Matrixelement

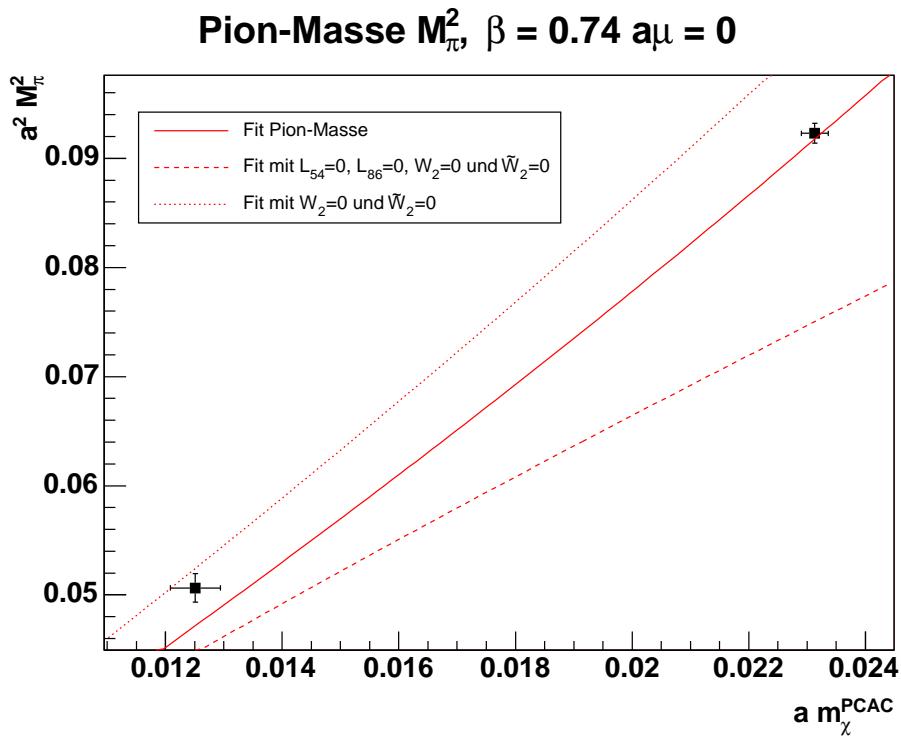


Abbildung 3.43: Fit Pion-Massenquadrat

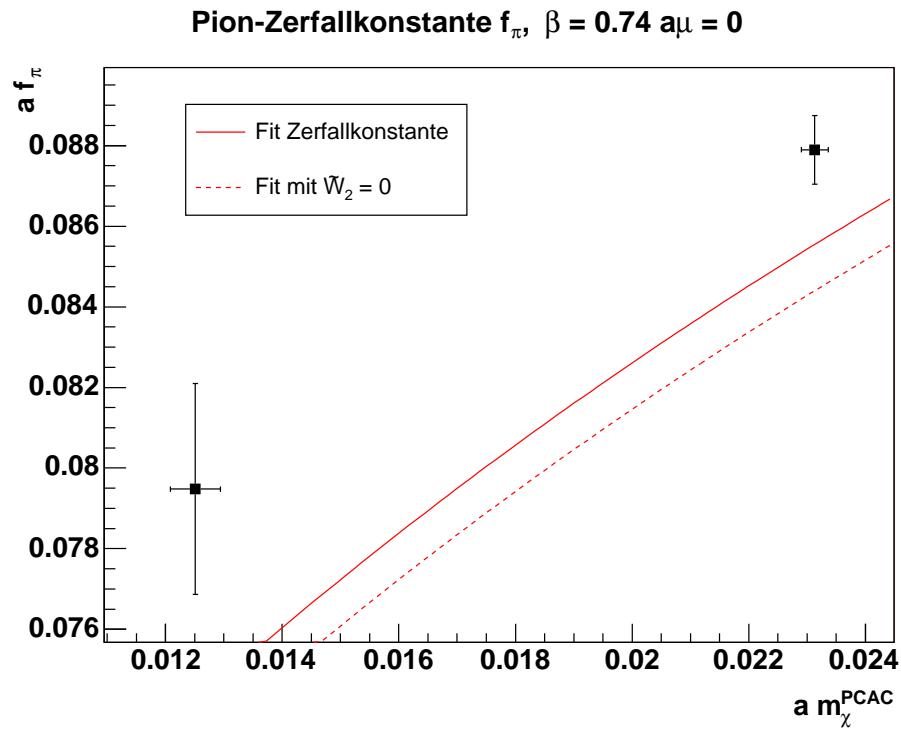


Abbildung 3.44: Fit Pion-Zerfallskonstante

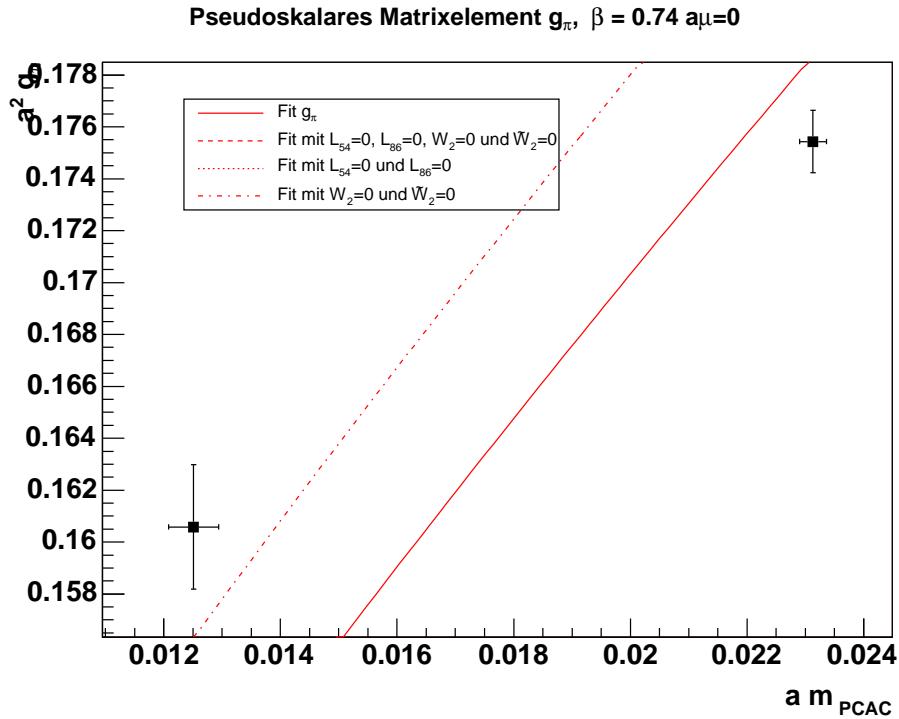


Abbildung 3.45: Fit pseudoskalares Matrixelement

3.7.7 Fit für $\beta = 0,67$, $\beta = 0,74$ und $\mu = 0,01$, $\mu = 0,0075$

Ein gleichzeitiger Fit für beide β Werte ist auch möglich und zeigt, ob die Annahme gerechtfertigt ist, dass die hier vorliegenden Simulationsdaten schon im Scaling-Bereich der Chiralen Störungstheorie liegen. Für die Fit-Parameter gilt :

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00078 ± 0.00013
L_{86}	0.00059 ± 0.00011
α_{45}	0.99 ± 0.16
α_{6845}	0.52 ± 0.33
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	7.5 ± 2.4
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	16.08 ± 0.66
Δ	240 ± 64

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.330 ± 0.015	65.2 ± 3.0
B	18.0 ± 1.2	3560 ± 240
B'	17.9 ± 2.3	3530 ± 460
$W W_0$	-0.00062 ± 0.00098	-4800 ± 7800
$\tilde{W} W_0$	0.0024 ± 0.0014	19000 ± 11000

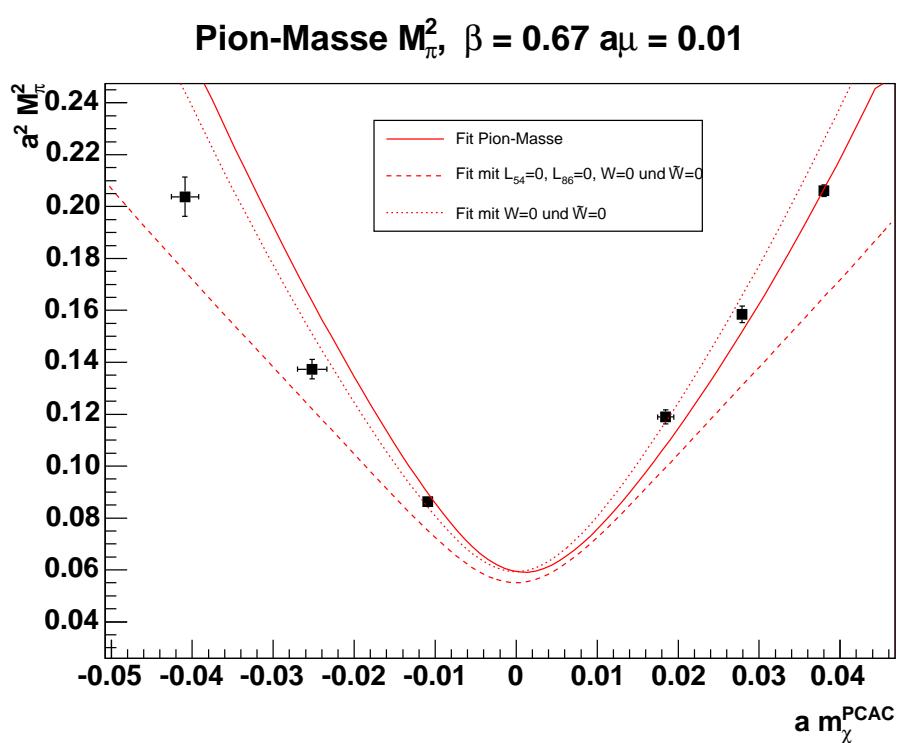


Abbildung 3.46: Fit Pion-Massenquadrate

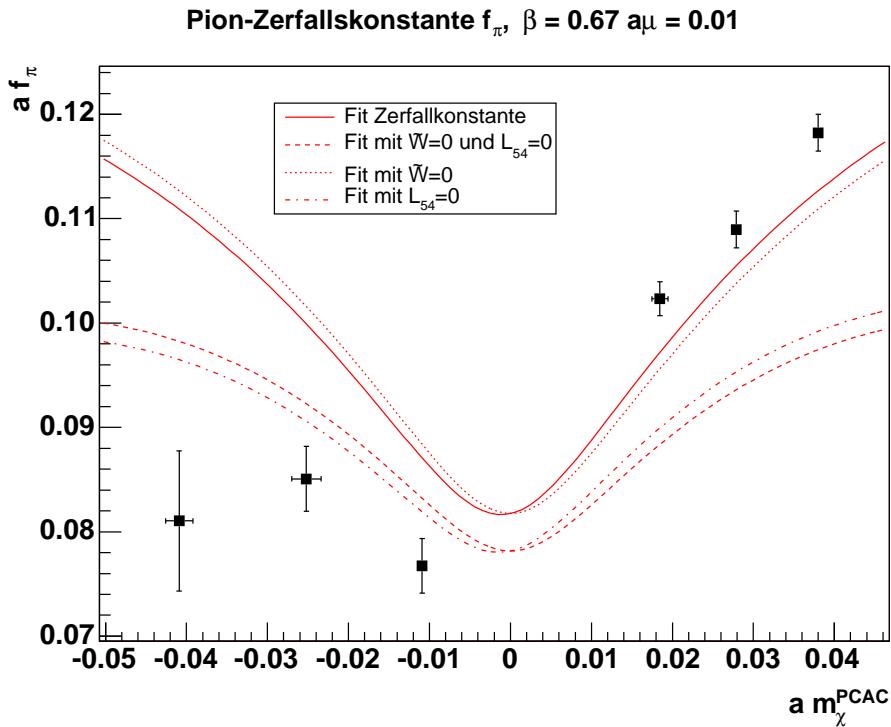


Abbildung 3.47: Fit Pion-Zerfallskonstante

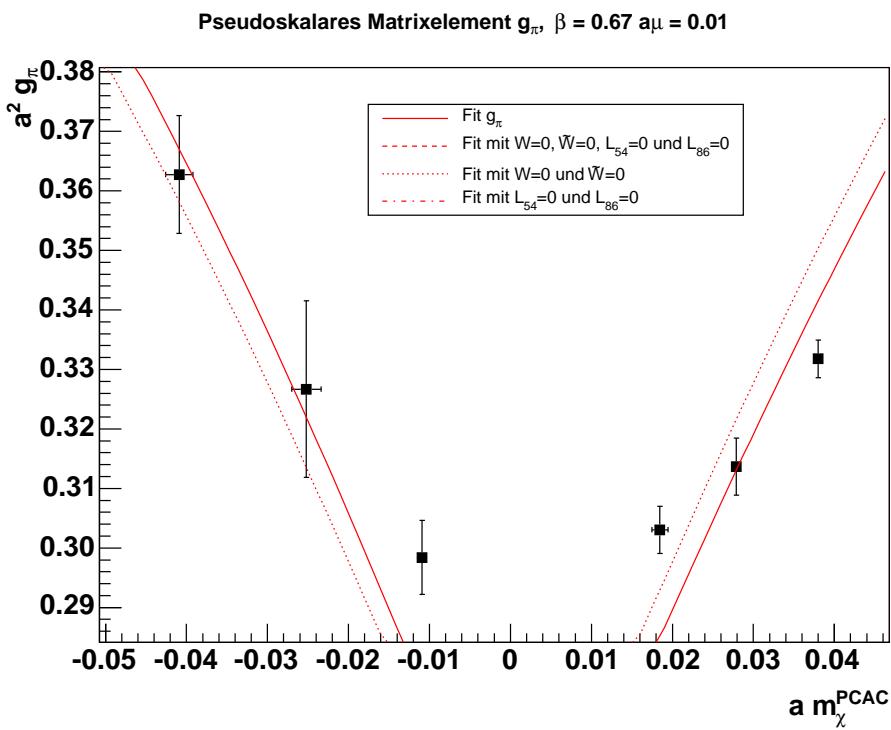


Abbildung 3.48: Fit pseudoskalares Matrixelement

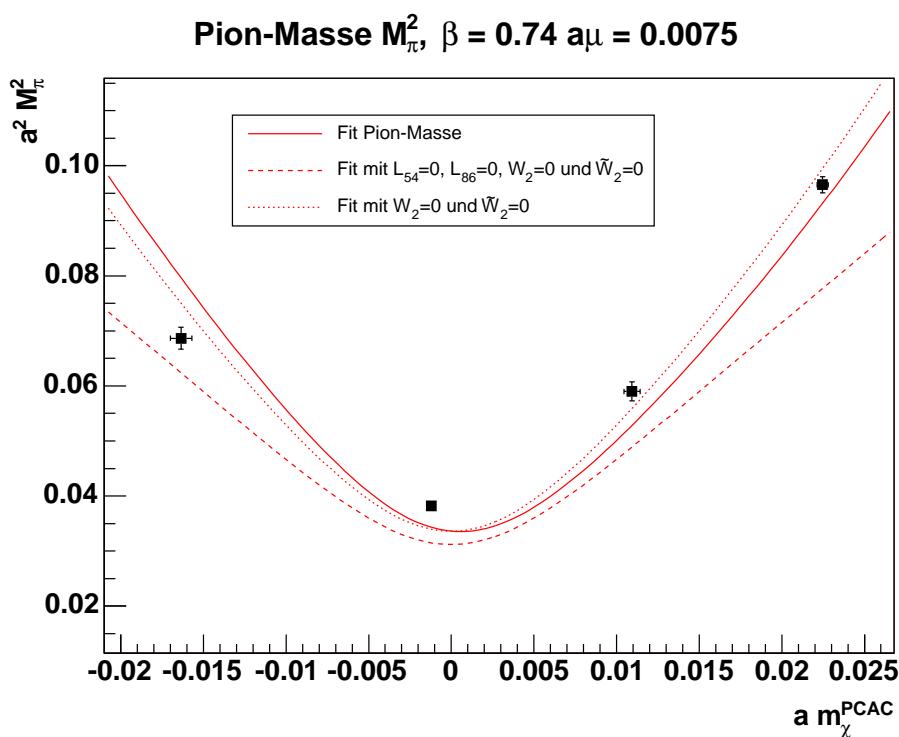


Abbildung 3.49: Fit Pion-Massenquadrat

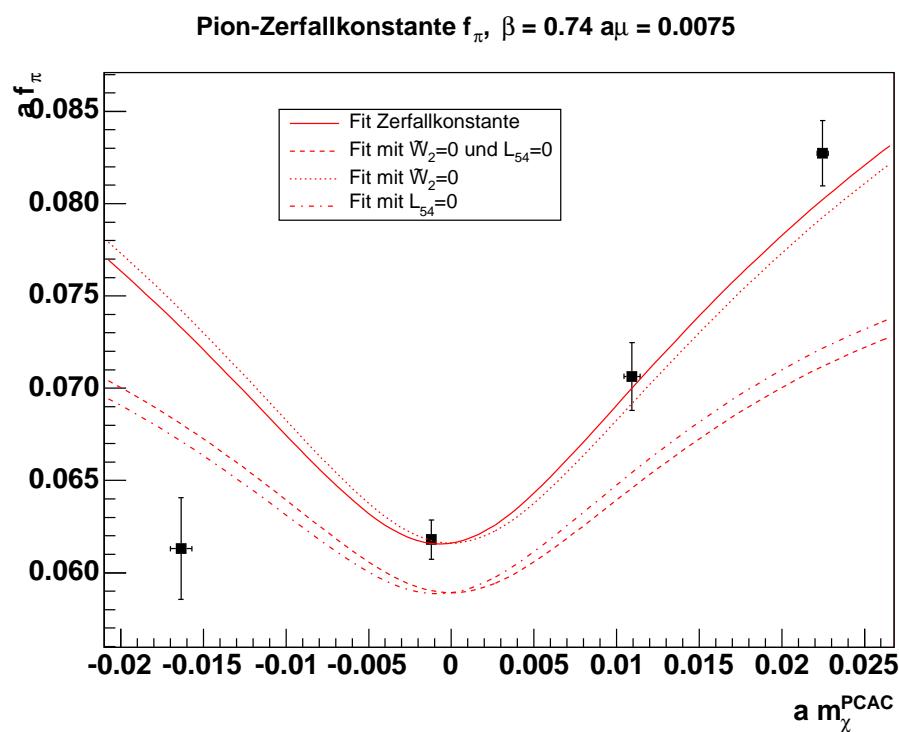


Abbildung 3.50: Fit Pion-Zerfallskonstante

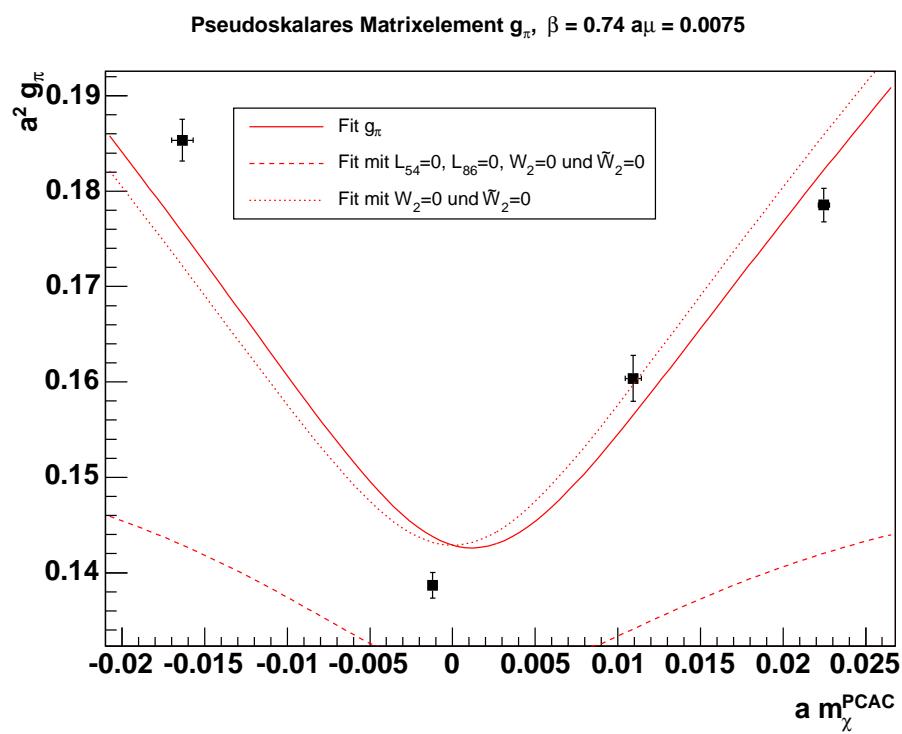


Abbildung 3.51: Fit pseudoskalares Matrixelement

3.7.8 Fit für $\beta = 0, 67, \beta = 0, 74$ und $\mu = 0, 01, \mu = 0, 0075$ und $\mu = 0$

Wie man an den Ergebnissen eines gemeinsamen Fits für beide Werte von β erkennen kann, werden die vorliegenden Daten gut durch die Gleichungen der Chiralen Störungstheorie modelliert. Die Werte der wesentlichen Parameter bei verschiedenem β weichen nur wenig voneinander ab, so dass die Annahme gerechtfertigt erscheint, dass sich die Daten schon im Scaling-Bereich befinden.

Nun kann man aber auch noch die Daten für $\mu = 0$ berücksichtigen und erhält :

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00117 ± 0.00028
L_{86}	0.00094 ± 0.00014
α_{45}	1.48 ± 0.35
α_{6845}	0.91 ± 0.50
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	5.1 ± 2.5
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	18.2 ± 1.6
Δ	510 ± 280

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.373 ± 0.024	73.7 ± 4.8
B	16.20 ± 0.61	3200 ± 120
B'	16.0 ± 1.9	3160 ± 380
$W W_0$	0.0023 ± 0.0021	18000 ± 17000
$\tilde{W} W_0$	0.0083 ± 0.0036	64000 ± 29000

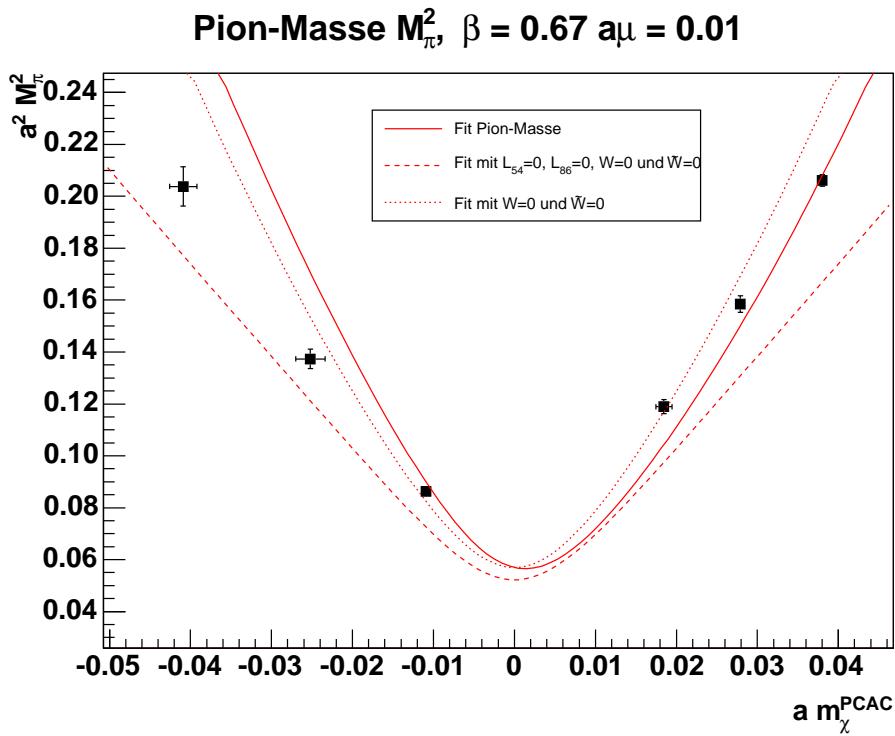


Abbildung 3.52: Fit Pion-Massenquadrate

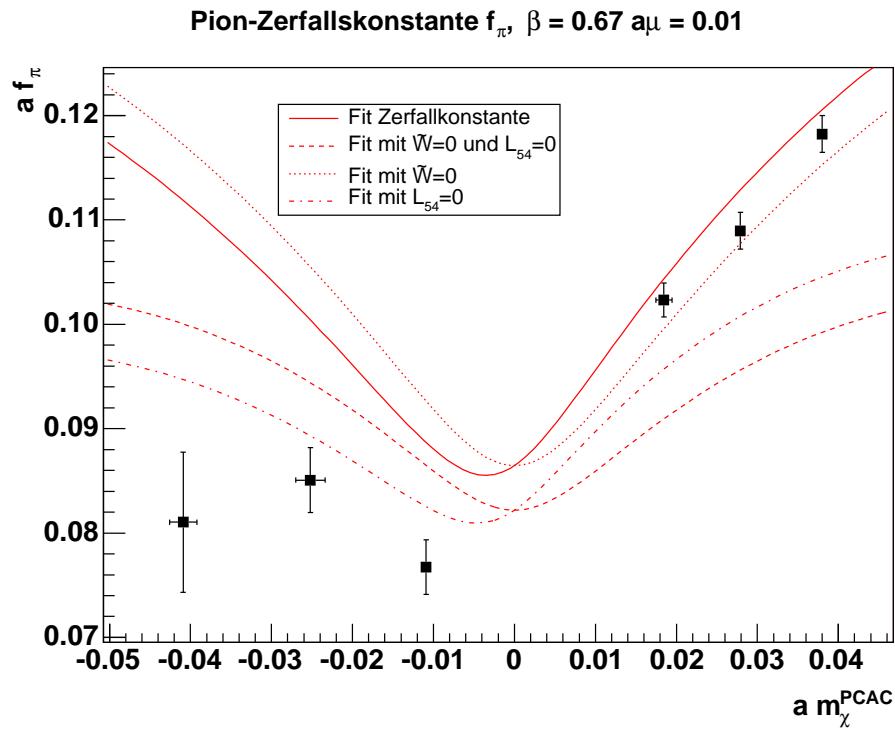


Abbildung 3.53: Fit Pion-Zerfallskonstante

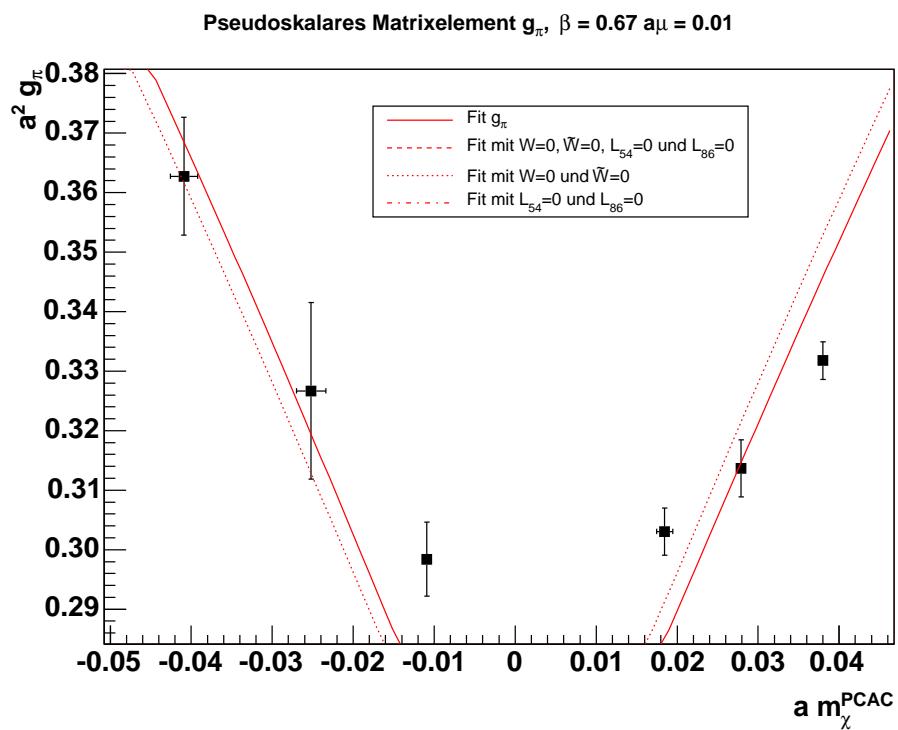


Abbildung 3.54: Fit pseudoskalares Matrixelement

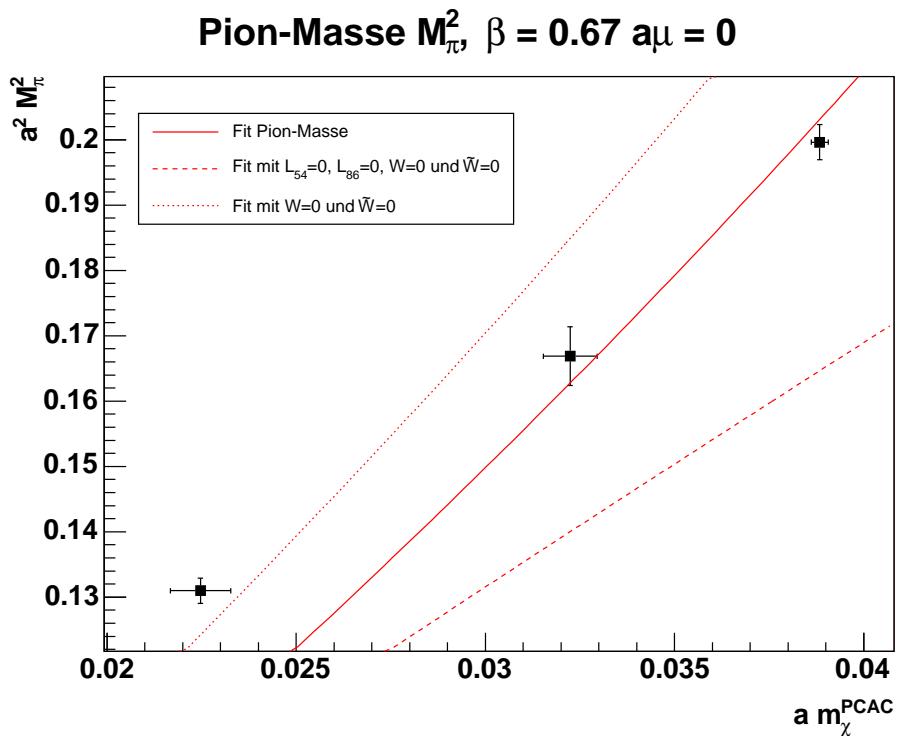


Abbildung 3.55: Fit Pion-Massenquadrat

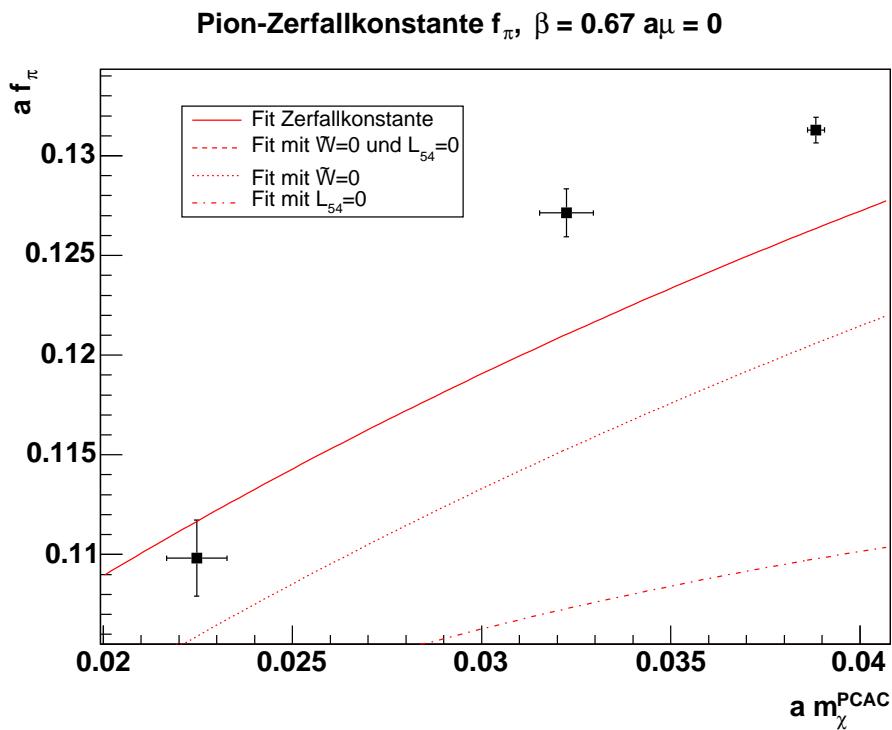


Abbildung 3.56: Fit Pion-Zerfalls konstante

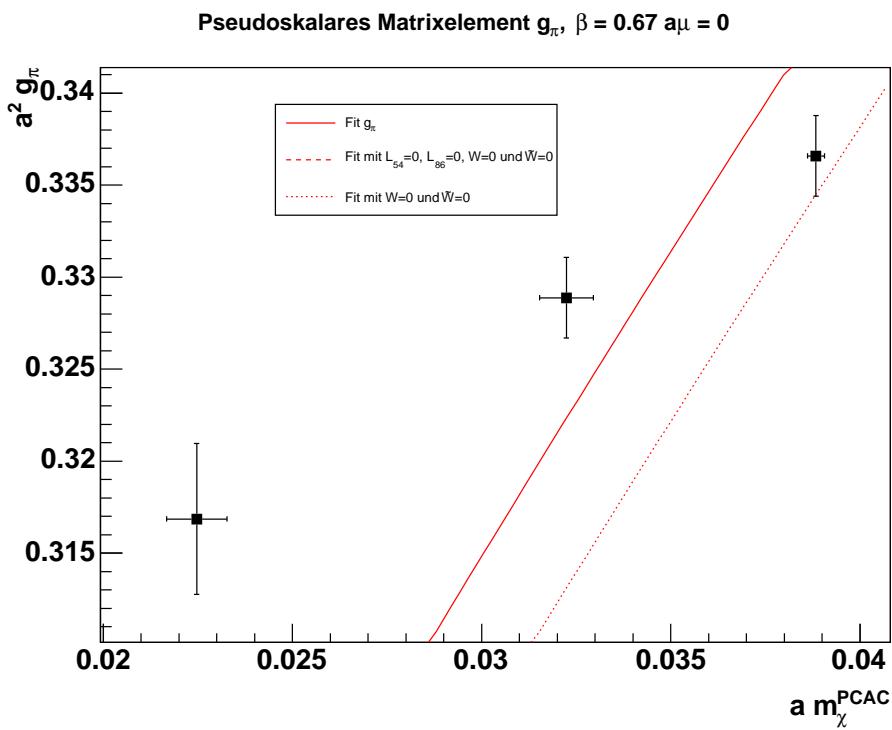


Abbildung 3.57: Fit pseudoskalares Matrixelement

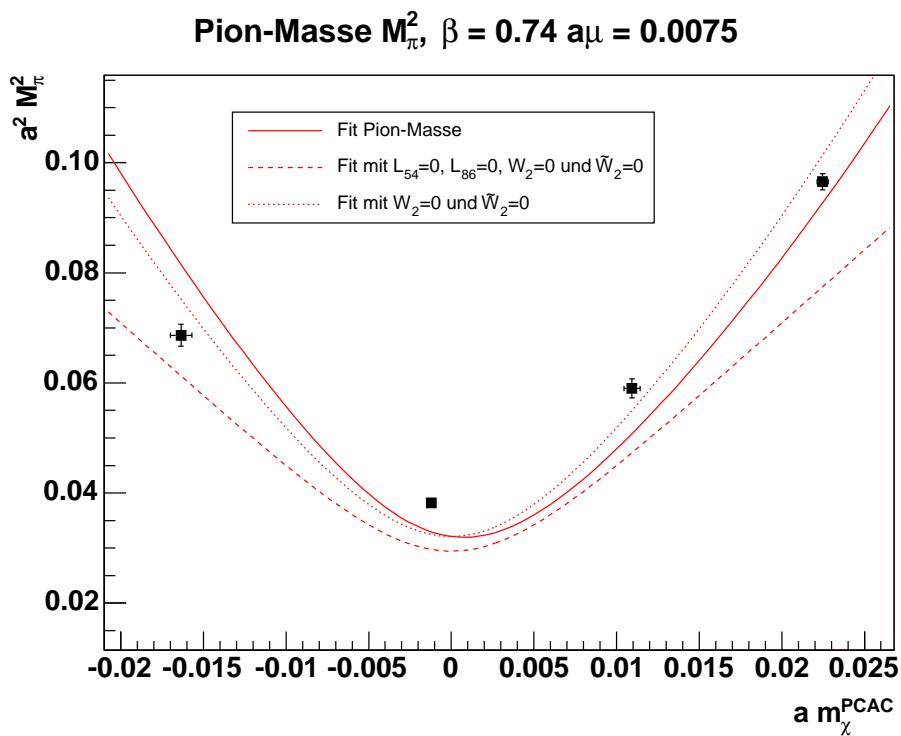


Abbildung 3.58: Fit Pion-Massenquadrat

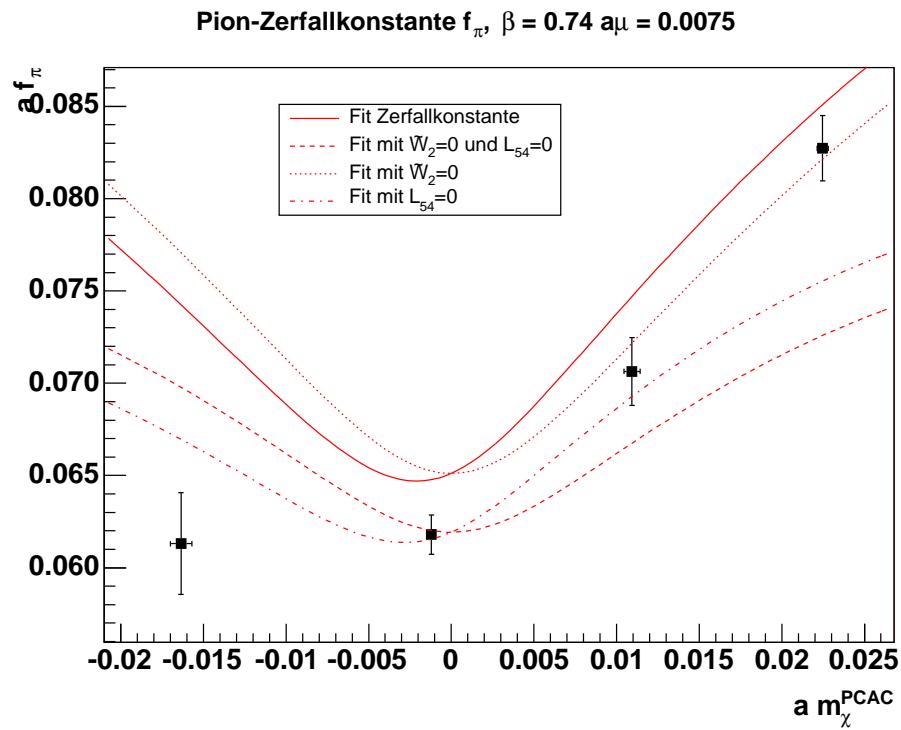


Abbildung 3.59: Fit Pion-Zerfallskonstante

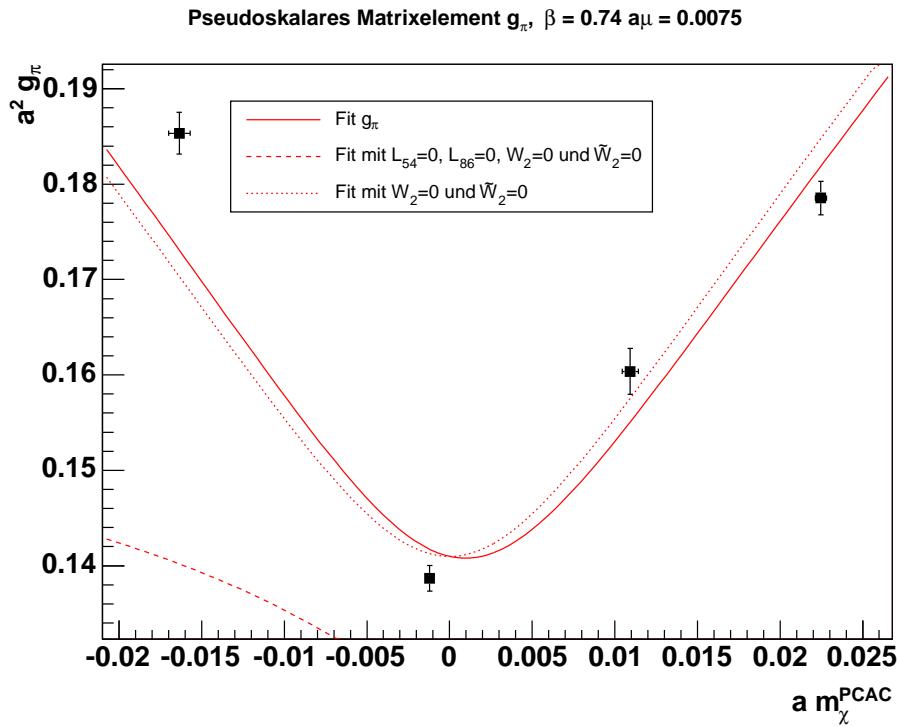


Abbildung 3.60: Fit pseudoskalares Matrixelement

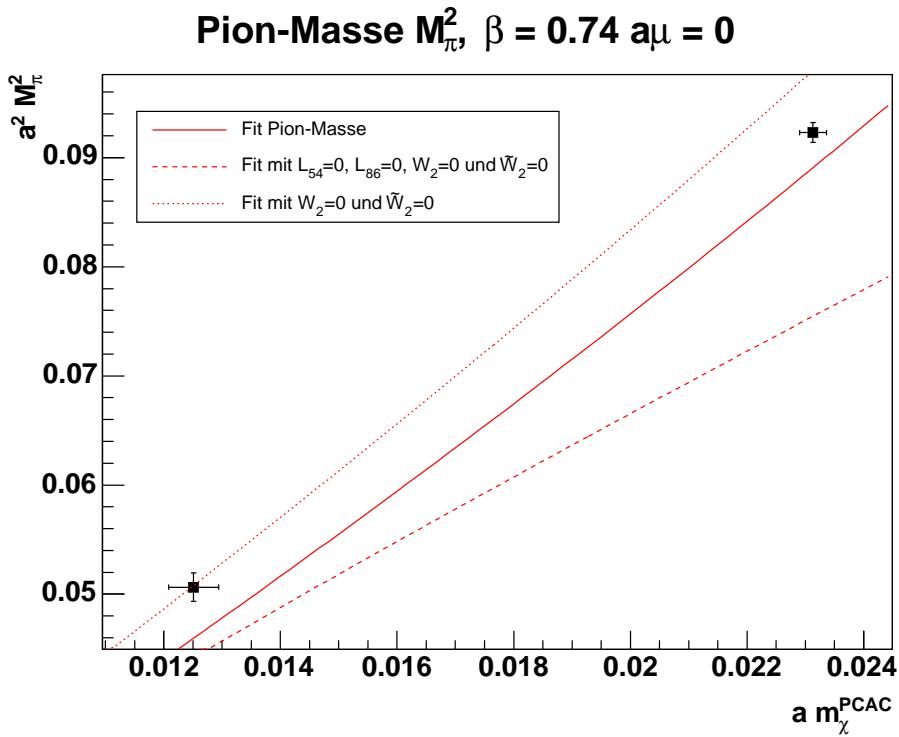


Abbildung 3.61: Fit Pion-Massenquadrate

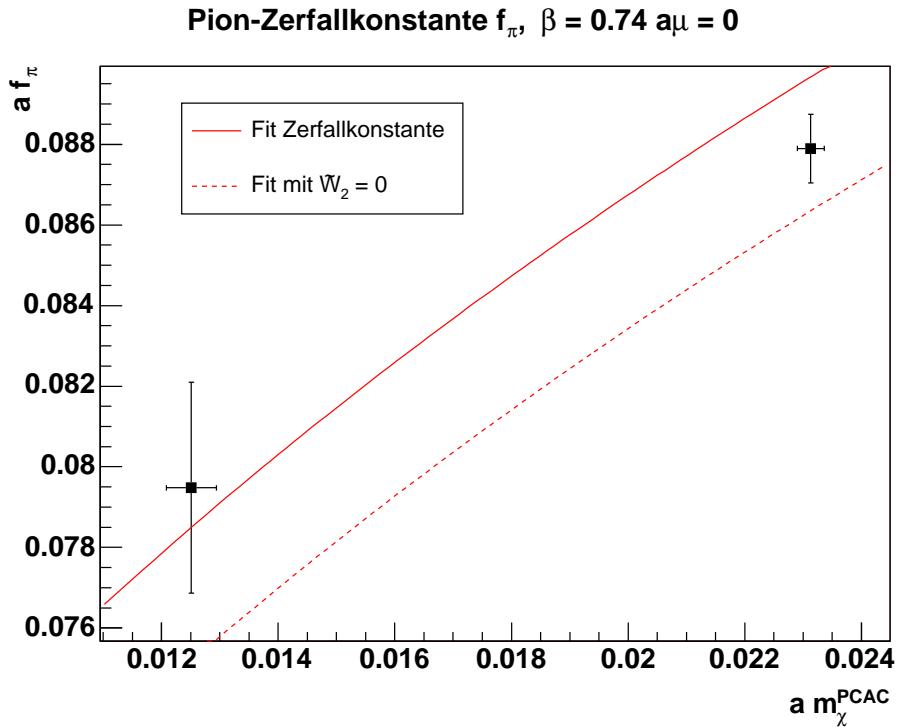


Abbildung 3.62: Fit Pion-Zerfalls konstante

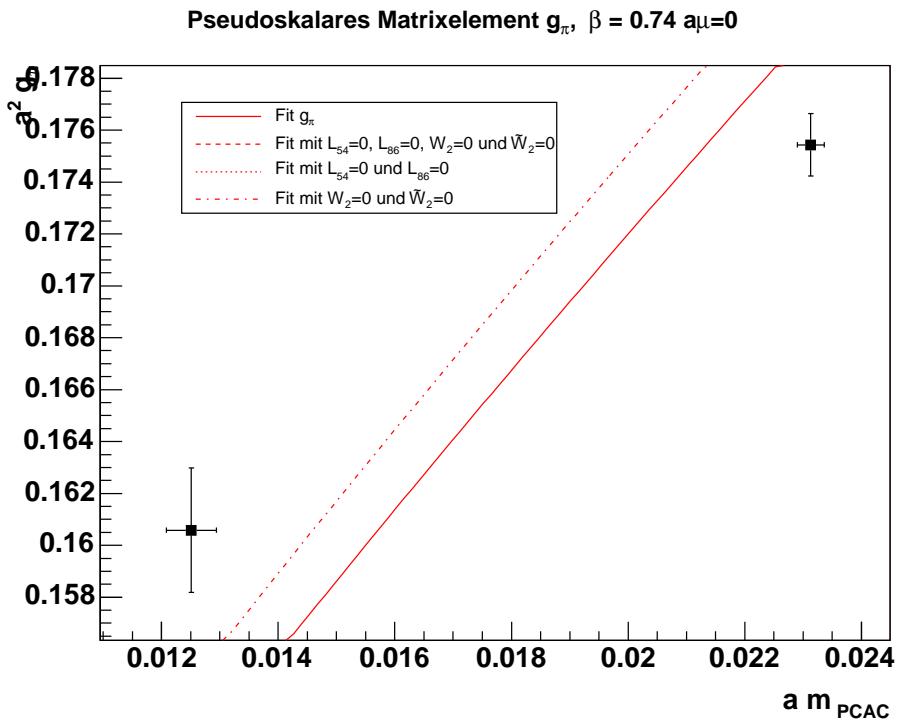


Abbildung 3.63: Fit pseudoskalares Matrixelement

3.7.9 Bestimmung des Renormierungsfaktors Z_A

Ein weiterer Test auf Konsistenz der Auswertung der Simulationsdaten ist die Bestimmung des Renormierungsfaktors Z_A aus den Fits selbst. Idealerweise sollte dieser Wert im Rahmen der Unsicherheit mit dem im Anhang tabellierten und davon unabhängigen Resultat übereinstimmen.

Es zeigt sich nun, dass die durch einen chiralen Fit bestimmten Werte für die Renormierungskonstanten durchaus mit den direkt aus den Simulationsdaten berechneten Werten verträglich sind.

Z_A für $\beta = 0,67$ mit $\mu = 0.01$ und $\mu = 0$

Der Wert für Z_A , der direkt aus den Simulationsdaten ermittelt wurde, beträgt ;

$$Z_A = 0,952 \pm 0,030$$

Der Wert für Z_A aus dem Fit liegt in der Nähe dieses Wertes.

	Dimensionslose Parameter
Z_A	0.8658 ± 0.0090
L_{54}	0.00050 ± 0.00015
L_{86}	0.000554 ± 0.000084
α_{45}	0.64 ± 0.19
α_{6845}	0.76 ± 0.28
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	5.9 ± 1.7
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	14.74 ± 0.69
Δ	183 ± 32

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.400 ± 0.016	78.9 ± 3.2
B	15.65 ± 0.52	3090 ± 100
$W W_0$	0.0046 ± 0.0015	35000 ± 12000
$\tilde{W} W_0$	0.0080 ± 0.0018	62000 ± 14000

Z'_A für $\beta = 0,74$ mit $\mu = 0.0075$ und $\mu = 0$

Auch hier kann die Größe von Z_A direkt aus den Simulationsdaten ermittelt werden und beträgt ;

$$Z'_A = 0,944 \pm 0,074$$

Der Wert für Z'_A liegt somit genau im Fehlerbereich des Werts für Z_A aus dem Fit.

	Dimensionslose Parameter
Z'_A	0.868 ± 0.018
L_{54}	0.00080 ± 0.00023
L_{86}	0.00076 ± 0.00010
α_{45}	1.00 ± 0.28
α_{6845}	0.92 ± 0.39
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	5.0 ± 2.0
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	16.2 ± 1.1
Δ	127 ± 26

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.335 ± 0.022	66.0 ± 4.4
B'	15.81 ± 0.97	3120 ± 190
$W W_0$	-0.0039 ± 0.0018	-30000 ± 14000
$\tilde{W} W_0$	-0.0011 ± 0.0027	-9000 ± 22000

Z_A und Z'_A für $\beta = 0,74$ und $\beta = 0,67$ mit $\mu = 0,0075$, $\mu = 0,01$ und $\mu = 0$

Berücksichtigt man nun beide β Werte, so ergibt sich das gleiche Bild wie bei den Einzelfits.

	Dimensionslose Parameter
Z_A	0.852 ± 0.014
Z'_A	0.909 ± 0.031
L_{54}	0.00074 ± 0.00012
L_{86}	0.000709 ± 0.000061
α_{45}	0.93 ± 0.15
α_{6845}	0.86 ± 0.22
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	5.3 ± 1.1
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	15.86 ± 0.59
Δ	348 ± 58

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.365 ± 0.015	72.0 ± 3.0
B	15.52 ± 0.47	3063 ± 94
B'	16.10 ± 0.73	3180 ± 150
$W W_0$	0.0009 ± 0.0010	6600 ± 8000
$\tilde{W} W_0$	0.0046 ± 0.0015	35000 ± 12000

3.7.10 Fit für positive Werte von $a m_\chi^{PCAC}$

Eine weitere Möglichkeit zur Überprüfung der Ergebnisse auf Konsistenz besteht darin, im Fit nur die statistisch sicheren Werte der Observablen bei positiven Quark-Massen zu berücksichtigen. Allerdings kann es aufgrund der nun noch kleineren Zahl von Datenpunkten zu dem Effekt kommen, dass der Iterationsprozess zur Minimierung von \mathcal{L} nun gegen ein physikalisch unsinniges Minimum konvergiert. Die Ursache für dieses Verhalten liegt darin, dass die Daten nun ohne zusätzliche Einschränkungen die zugrunde liegende Physik nicht mehr ausreichend beschreiben.

Bei den hier vorliegenden Daten tritt der Effekt der Konvergenz gegen ein unphysikalisches Minimum im Fall der Observablen vor allem bei $\beta = 0.67$ auf. Ganz besonders deutlich zeigt sich dieses Verhalten bei dem Fit der Pion-Masse. Am Ende dieses Abschnitts sind die entsprechenden Abbildungen zu finden, die den hier beschriebenen Effekt veranschaulichen.

Macht man nun eine Näherung und vernachlässigt NLO-Gitter-Korrekturen, die durch die Konstanten W und \tilde{W} parametrisiert werden, so tritt dieser Effekt nicht mehr auf und der Iterationsprozess konvergiert gegen ein physikalisch sinnvolles, also im wesentlichen symmetrisches Resultat. In einem weiteren Satz von Abbildungen werden dann abschließend einige der Ergebnisse veranschaulicht, die zu den folgenden Analysen mit $W = 0$ und $\tilde{W} = 0$ gehören.

Fit $\beta = 0.67$ **mit** $\mu = 0.01$ **und** $\mu = 0$. $Z_A = 0.952$ **fixiert**

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00139 ± 0.00033
L_{86}	0.00092 ± 0.00016
α_{45}	1.76 ± 0.42
α_{6845}	0.58 ± 0.58
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	7.1 ± 4.1
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	19.5 ± 2.0
Δ	121 ± 59

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.407 ± 0.017	80.3 ± 3.4
B	14.81 ± 0.57	2920 ± 110

Fit für $\beta = 0.74$ mit $\mu = 0.0075$ und $\mu = 0.$ $Z'_A = 0.944$ fixiert

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00104 ± 0.00053
L_{86}	0.00071 ± 0.00020
α_{45}	1.31 ± 0.66
α_{6845}	0.49 ± 0.83
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	7.7 ± 6.4
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	17.4 ± 2.9
Δ	16 ± 39

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.462 ± 0.027	91.2 ± 5.4
B'	17.6 ± 1.1	3460 ± 220

Fit für $\beta = 0.74$ und $\beta = 0.67$ mit $\mu = 0.0075$, $\mu = 0.01$ und $\mu = 0.$ Z_A und Z'_A fixiert

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00123 ± 0.00028
L_{86}	0.00081 ± 0.00015
α_{45}	1.56 ± 0.35
α_{6845}	0.49 ± 0.52
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	7.7 ± 4.0
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	18.6 ± 1.6
Δ	140 ± 190

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.425 ± 0.022	83.9 ± 4.4
B	14.94 ± 0.57	2950 ± 110
B'	17.8 ± 1.9	3520 ± 380

Z_A wird bestimmt für $\beta = 0.67$ mit $\mu = 0.01$ und $\mu = 0$

Der Wert für Z_A , der direkt aus den Simulationsdaten ermittelt wurde, beträgt ;

$$Z_A = 0.952 \pm 0.030$$

und liegt somit genau im Fehlerbereich des Werts für Z_A aus dem Fit.

	Dimensionslose Parameter
Z_A	0.888 ± 0.010
L_{54}	0.00086 ± 0.00017
L_{86}	0.00070 ± 0.00011
α_{45}	1.08 ± 0.21
α_{6845}	0.68 ± 0.35
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	6.4 ± 2.2
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	16.47 ± 0.88
Δ	77 ± 22

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.402 ± 0.017	79.3 ± 3.4
B	14.43 ± 0.52	2850 ± 100

Z'_A wird bestimmt für $\beta = 0.74$ mit $\mu = 0.0075$ und $\mu = 0$

Auch hier kann die Größe von Z_A direkt aus den Simulationsdaten ermittelt werden und beträgt ;

$$Z'_A = 0.944 \pm 0.074$$

Der Wert für Z'_A aus dem Fit liegt in der Nähe dieses Wertes.

	Dimensionslose Parameter
Z'_A	0.910 ± 0.018
L_{54}	0.00082 ± 0.00023
L_{86}	0.00064 ± 0.00013
α_{45}	1.03 ± 0.29
α_{6845}	0.60 ± 0.44
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	6.9 ± 3.0
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	16.3 ± 1.2
Δ	13 ± 12

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.455 ± 0.021	89.9 ± 4.2
B'	17.17 ± 0.75	3390 ± 150

Z_A und Z'_A werden bestimmt für $\beta = 0.74$ und $\beta = 0.67$ mit $\mu = 0.0075$, $\mu = 0.01$ und $\mu = 0$

	Dimensionslose Parameter
Z_A	0.896 ± 0.011
Z'_A	0.880 ± 0.023
L_{54}	0.00080 ± 0.00013
L_{86}	0.000649 ± 0.000077
α_{45}	1.01 ± 0.17
α_{6845}	0.63 ± 0.26
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	6.7 ± 1.7
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	16.19 ± 0.69
Δ	99 ± 36

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.416 ± 0.013	82.2 ± 2.6
B	14.51 ± 0.42	2864 ± 84
B'	17.19 ± 0.53	3390 ± 110

Konvergenz gegen ein unphysikalisches Minimum

In den folgenden Abbildungen lässt sich der Effekt der Konvergenz gegen ein offensichtlich unphysikalisches Minimum deutlich erkennen. Zum Vergleich hier noch eine Übersicht der entsprechenden Fit-Resultate.

	Dimensionslose Parameter
L_{54}	0.00107 ± 0.00081
L_{86}	0.00040 ± 0.00027
α_{45}	1.4 ± 1.0
α_{6845}	-0.3 ± 1.2
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	18 ± 22
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	17.6 ± 4.5
Δ	48 ± 53

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.304 ± 0.074	60 ± 15
B	13.77 ± 0.48	2716 ± 96
$W W_0$	0.0288 ± 0.0050	221000 ± 40000
$\tilde{W} W_0$	0.0134 ± 0.0076	103000 ± 61000

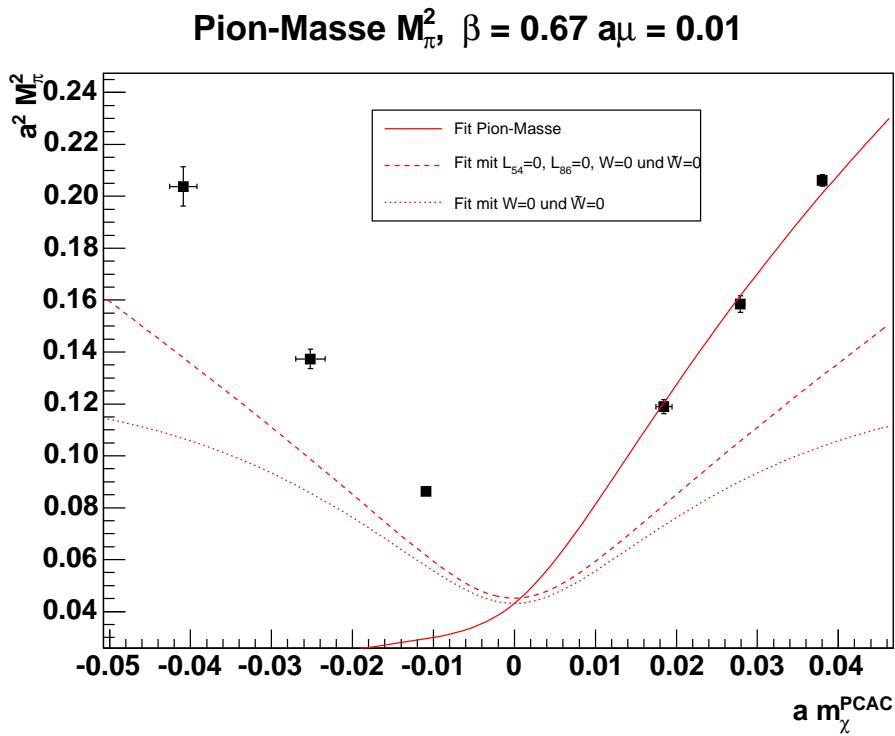


Abbildung 3.64: Fit Pion-Massenquadrate

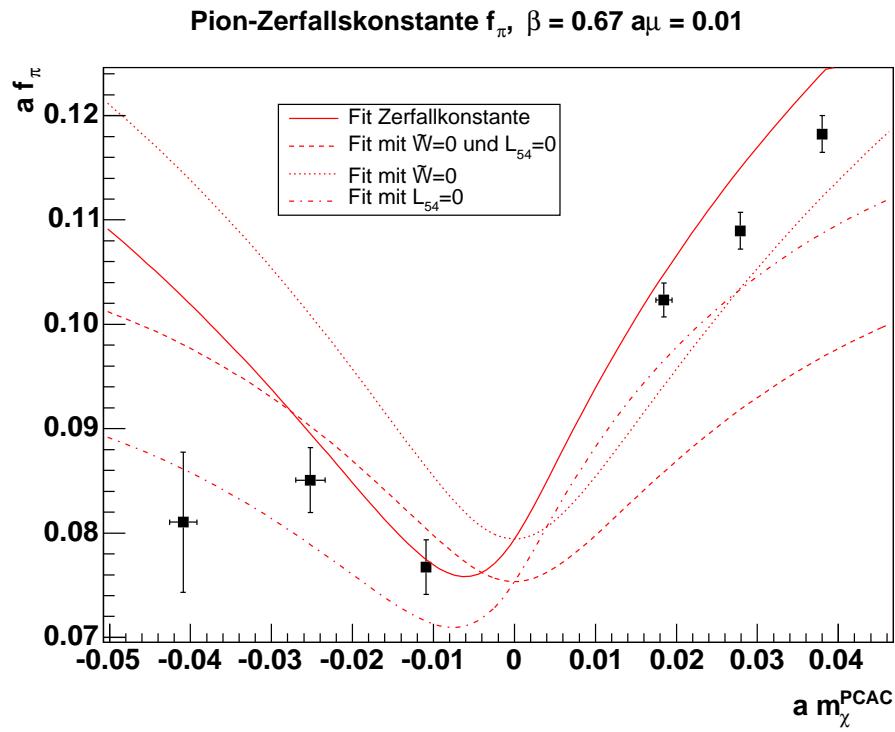


Abbildung 3.65: Fit Pion-Zerfallskonstante

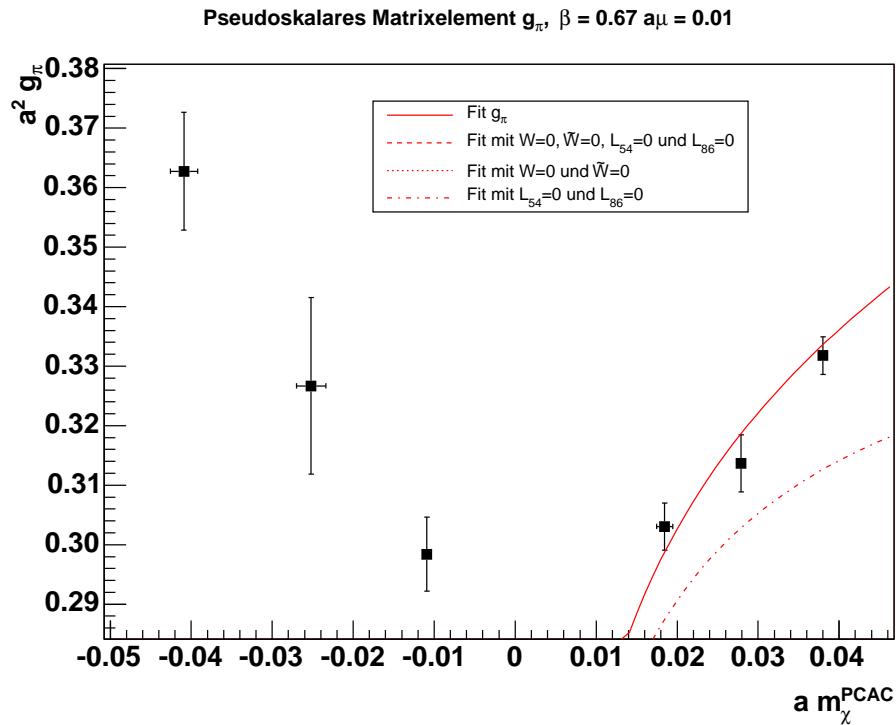


Abbildung 3.66: Fit pseudoskalares Matrixelement

Abbildungen für den Fit mit $\beta = 0.74$ und $\beta = 0.67$ mit $\mu = 0.0075$, $\mu = 0.01$ und $\mu = 0$. Z_A und Z'_A fixiert

Die folgenden Abbildungen zeigen nun zum Vergleich die Ergebnisse eines Fits mit $W = 0$ und $\tilde{W} = 0$. Man kann deutlich erkennen, dass diese Ergebnisse gut mit den bisherigen übereinstimmen, was auf ein hohes Maß an Konsistenz der Analysen hindeutet. Letztlich spiegelt sich dies auch in den weiter oben tabellierten Werten der Fit-Parameter wieder.

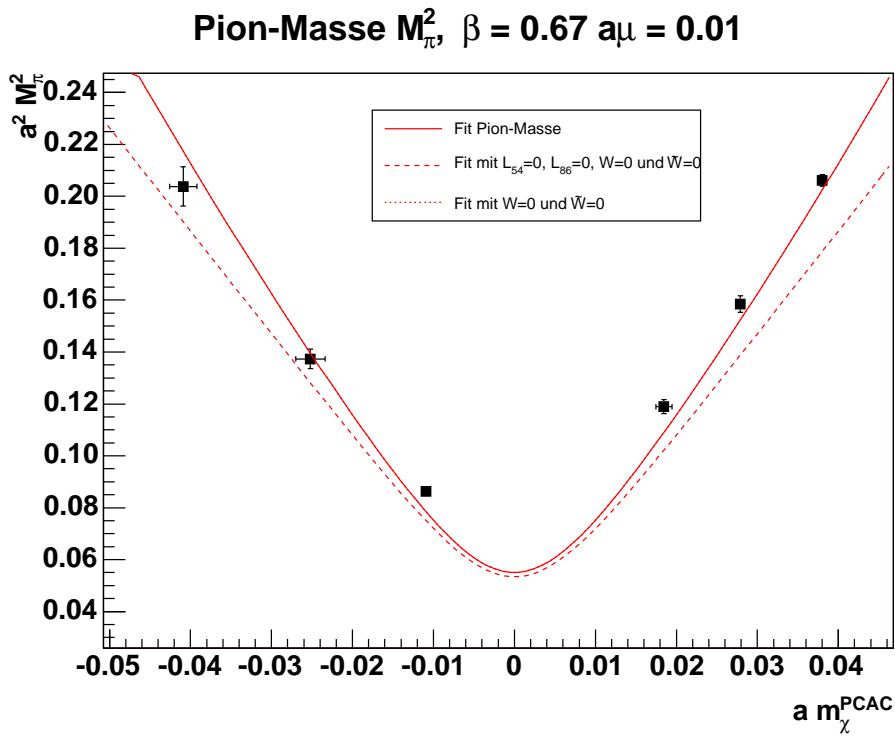


Abbildung 3.67: Fit Pion-Massenquadrate

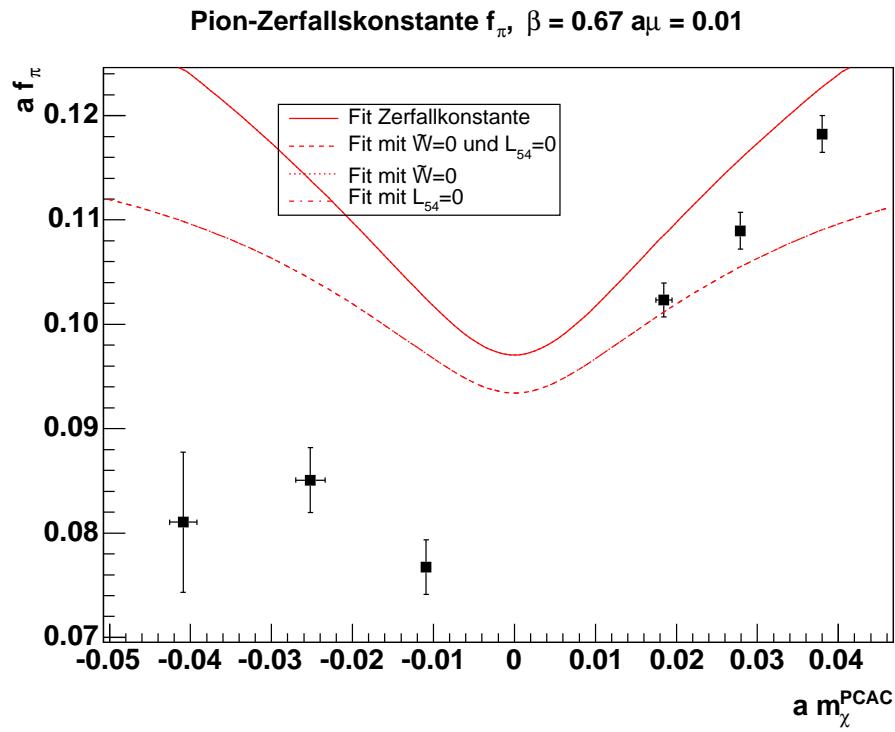


Abbildung 3.68: Fit Pion-Zerfallskonstante

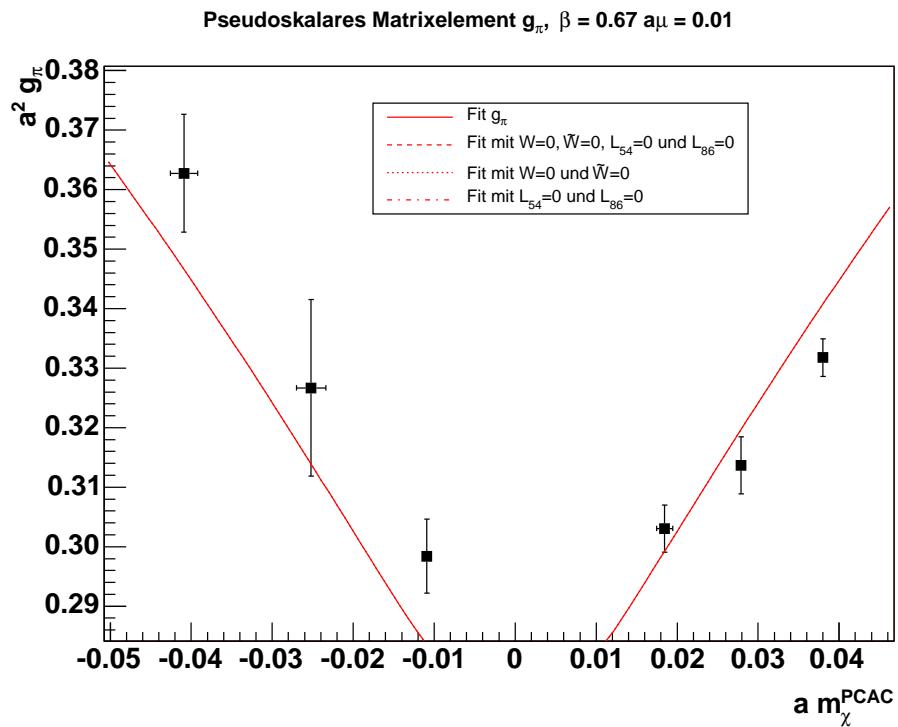


Abbildung 3.69: Fit pseudoskalares Matrixelement

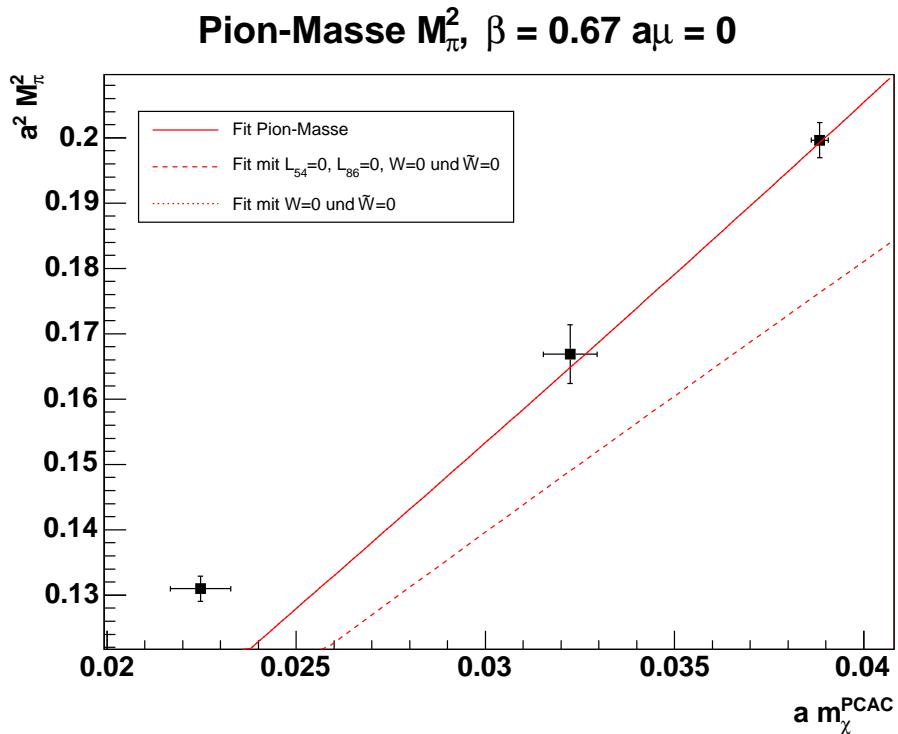


Abbildung 3.70: Fit Pion-Massenquadrat

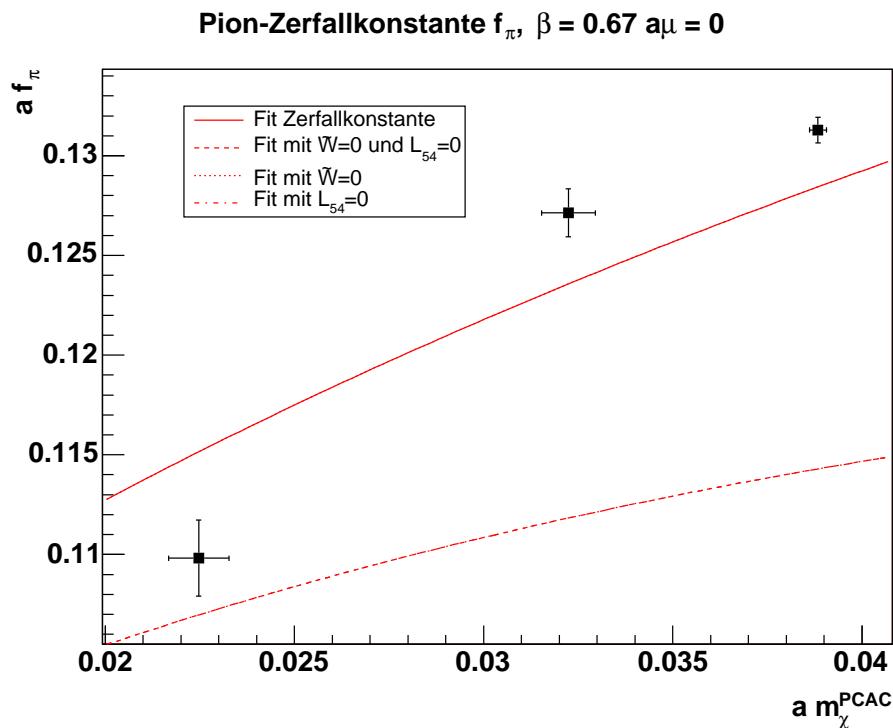


Abbildung 3.71: Fit Pion-Zerfallskonstante

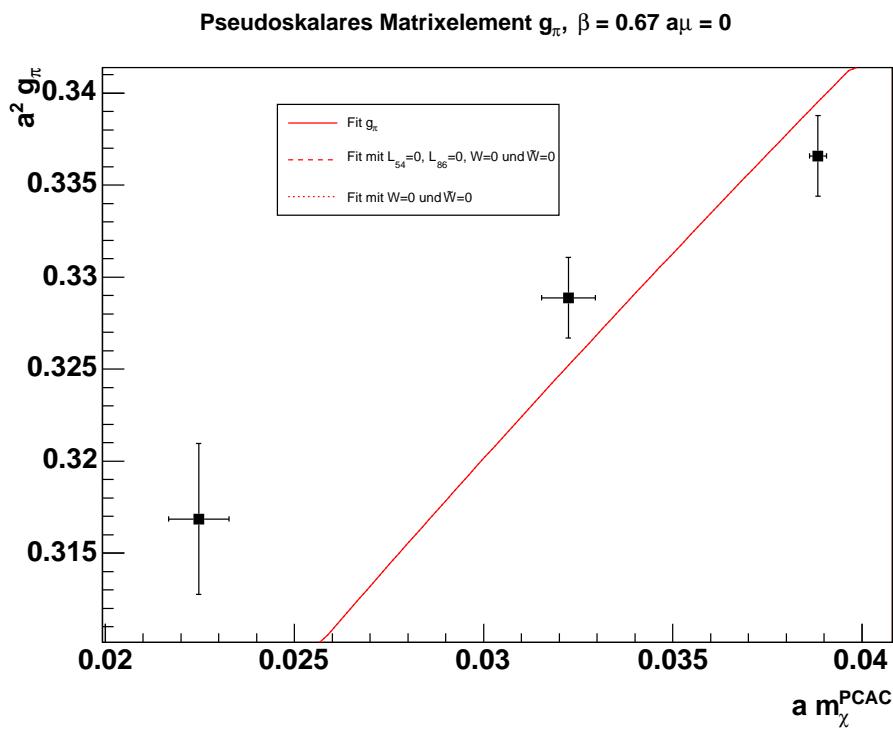


Abbildung 3.72: Fit pseudoskalares Matrixelement

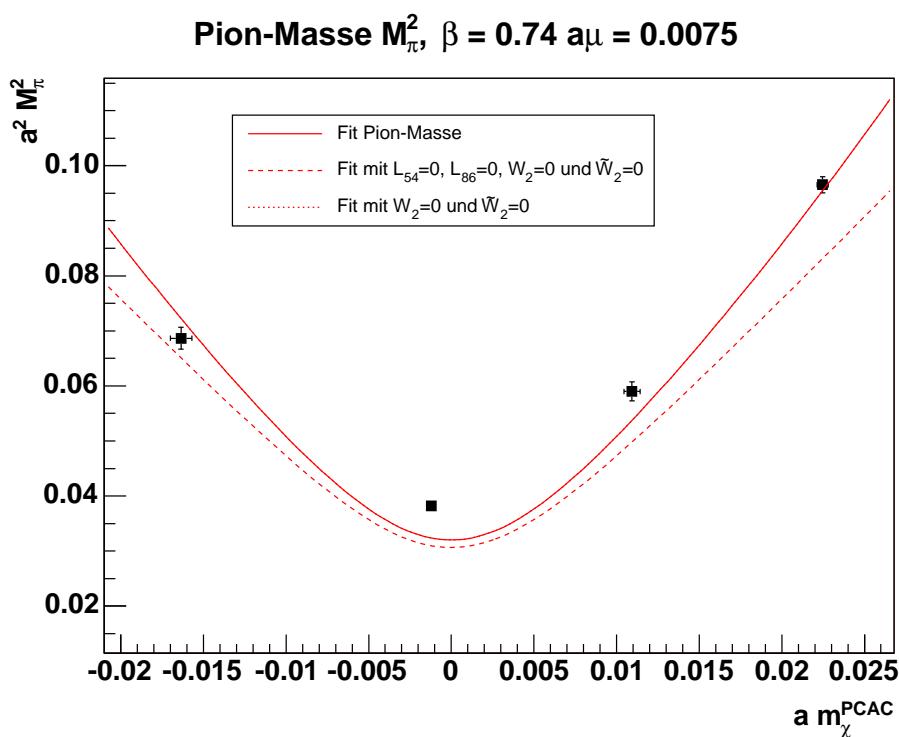


Abbildung 3.73: Fit Pion-Massenquadrat

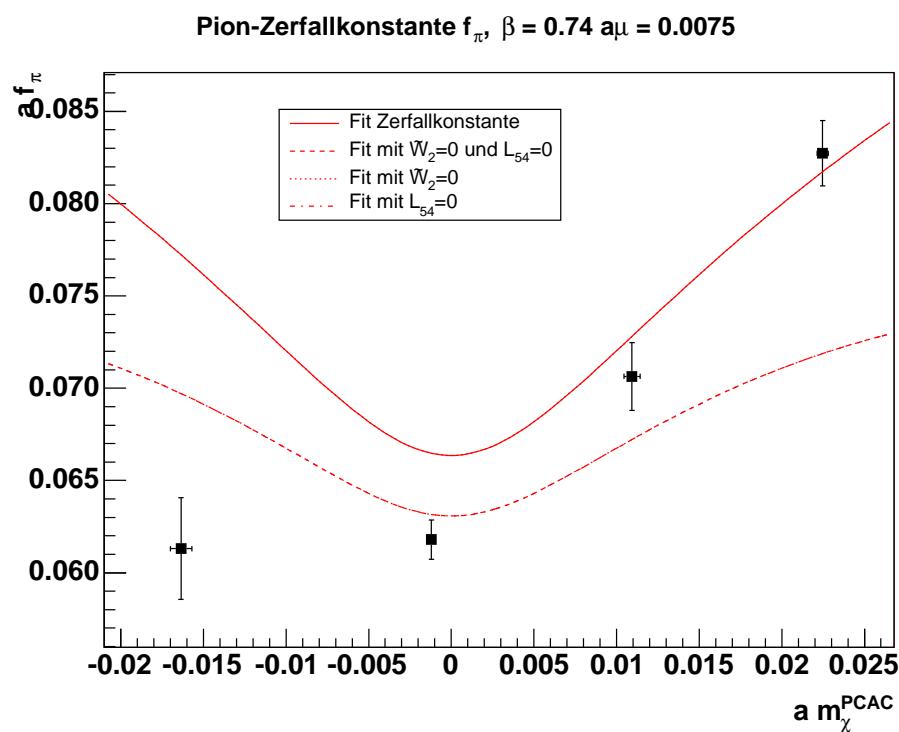


Abbildung 3.74: Fit Pion-Zerfallskonstante

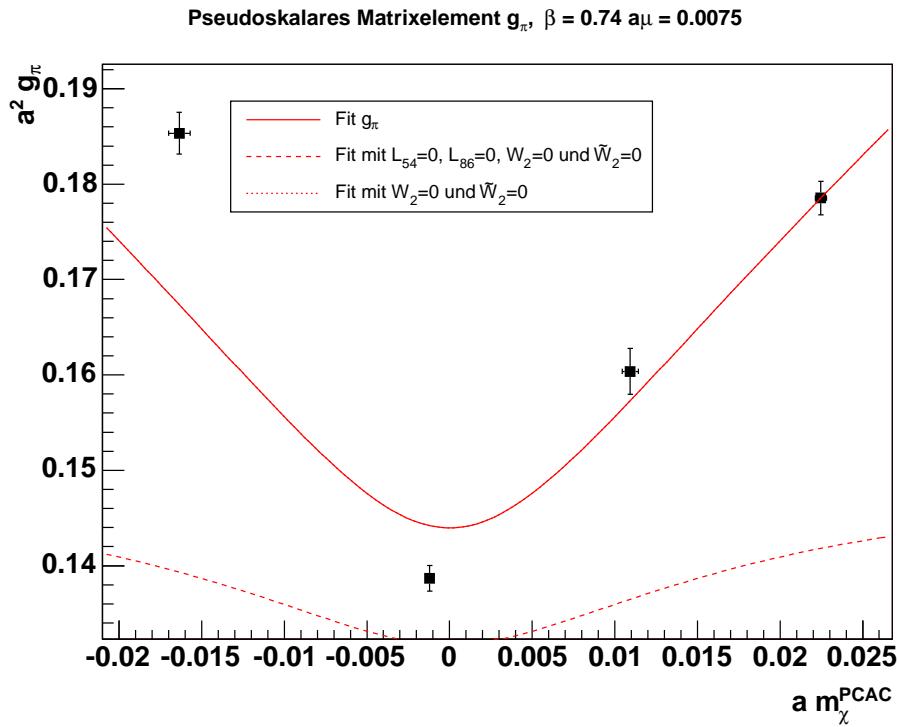


Abbildung 3.75: Fit pseudoskalares Matrixelement

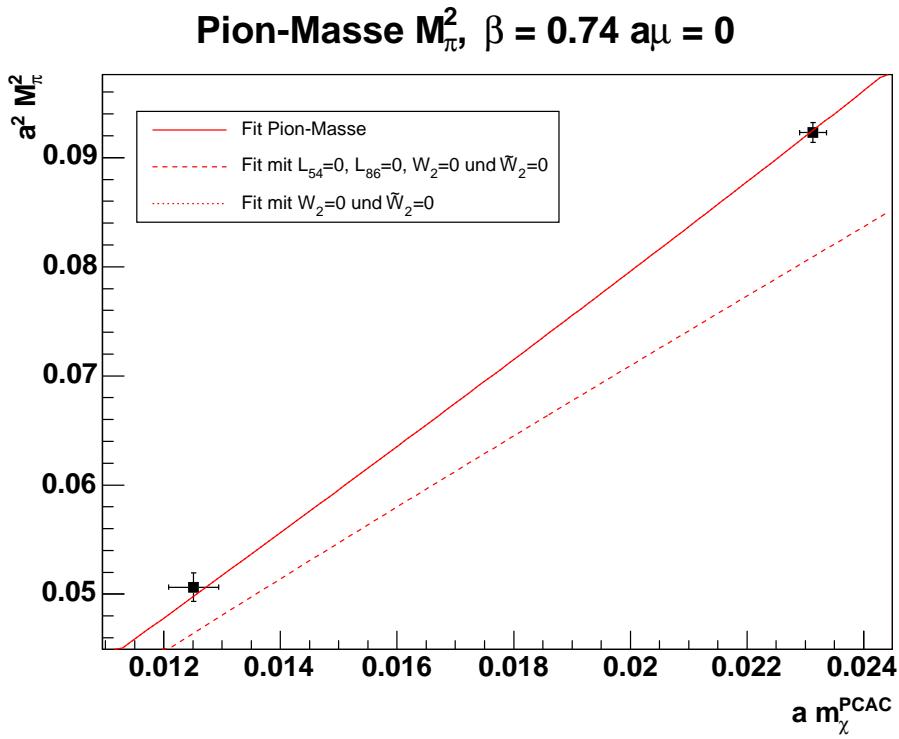


Abbildung 3.76: Fit Pion-Massenquadrate

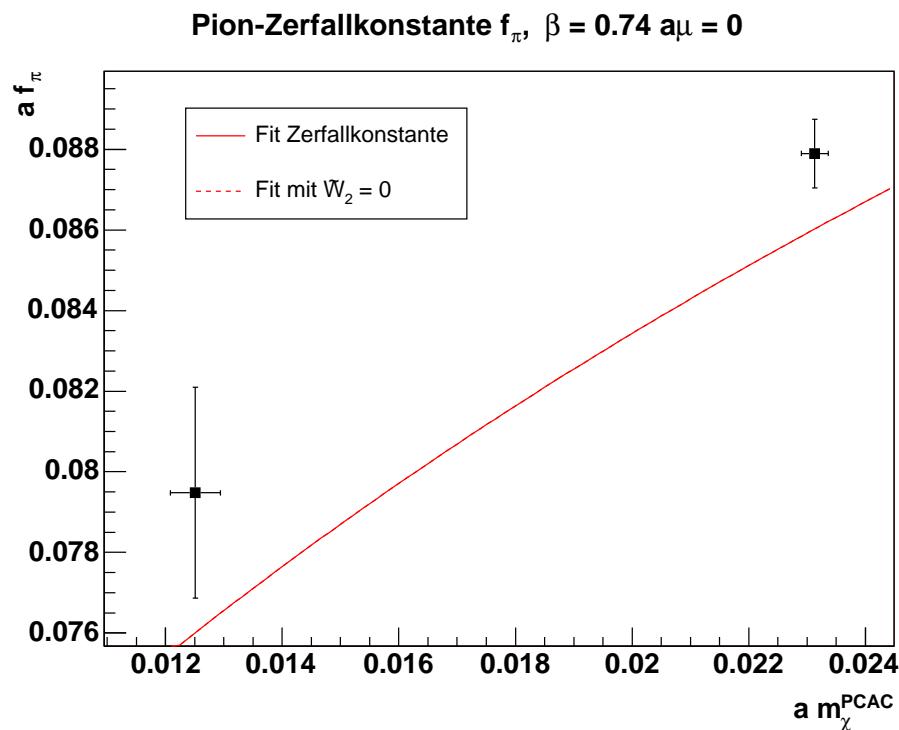


Abbildung 3.77: Fit Pion-Zerfallskonstante

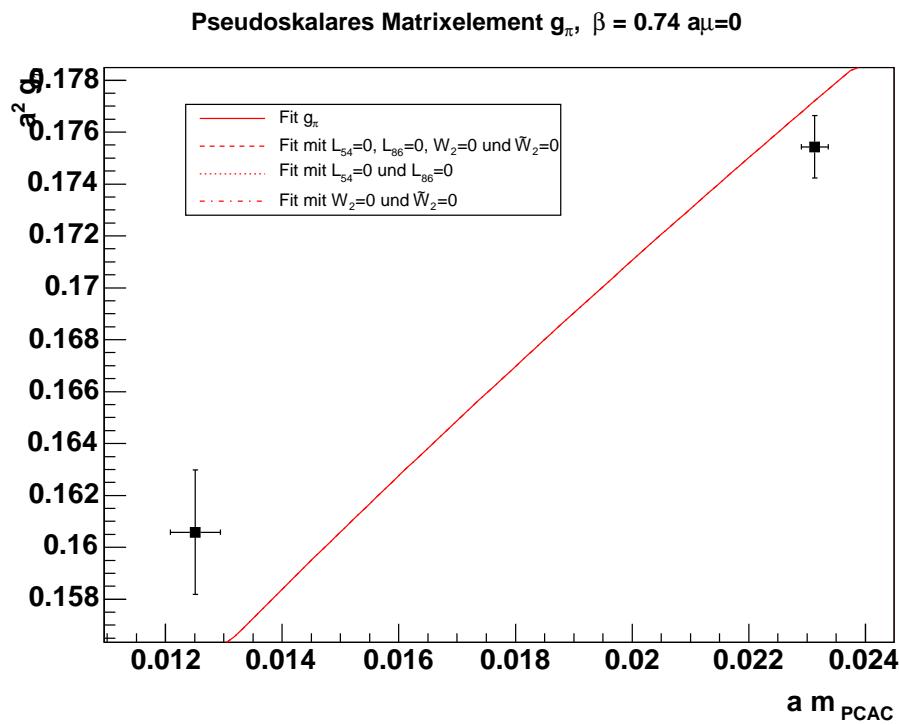


Abbildung 3.78: Fit pseudoskalares Matrixelement

3.7.11 Fit für $\beta = 0.67$ und $\beta = 0.74$ bis $\mathcal{O}(a^2)$

Da im Fall der PCAC-Quark-Masse die Gitter-Effekte nicht mehr als klein angesehen werden können, ist es aufschlussreich, einen Gesamt-Fit durchzuführen, in dem Gitterterme für m_q^2 bis zur Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ berücksichtigt werden.

In dieser Ordnung lauten die Ergebnisse der Chiralen Störungstheorie :

$$\begin{aligned}
\bar{\chi} &= 2B \frac{1}{a} \sqrt{\left(a m_{\chi, \text{lattice}}^{\text{PCAC}}\right)^2 + \left(\frac{a \mu_{\text{lattice}}}{Z_A}\right)^2} \quad \text{und} \quad B \equiv B_0 \frac{Z_A}{Z_P} \\
\chi'_0 &= 2B_0 (m_0 - m_c) \quad \text{und} \quad a m_0 = \frac{1}{2\kappa} - 4 \\
m_{\pi^\pm}^2 &= \bar{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi}^2 \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \bar{\chi}^2 \\
&\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \chi'_{\text{PCAC}} \rho \\
&\quad + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho^2 \frac{\chi'^2_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}^2} \left(1 - \frac{\chi'^2_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}^2}\right) \\
&\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - W_{54} - 2L_{86} + W_{86}) \rho^2 \left(1 - \frac{\chi'^2_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}^2}\right)^2 \\
&= \bar{\chi} + \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi}^2 \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{8}{F_0^2} (-L_{54} + 2L_{86}) \bar{\chi}^2 \\
&\quad + \frac{8}{F_0^2} (W - \tilde{W}) \chi'_{\text{PCAC}} \rho + \frac{16}{F_0^2} W' \rho^2 \frac{\chi'^2_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}^2} \left(1 - \frac{\chi'^2_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}^2}\right) \\
&\quad + \frac{8}{F_0^2} (W - \tilde{W}) \rho^2 \left(1 - \frac{\chi'^2_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}^2}\right)^2 \\
\frac{f_\pi}{F_0} &= 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \left\{ L_{54} \bar{\chi} + (-L_{54} + W_{54}) \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}} \right\} \\
&= 1 - \frac{1}{16\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} \left\{ L_{54} \bar{\chi} + \tilde{W} \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}} \right\} \\
\frac{g_\pi}{F_0 B_0} &= 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) \bar{\chi} \\
&\quad + \frac{4}{F_0^2} (2W_{86} - 4L_{86} - W_{54} + L_{54}) \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}} \\
&= 1 - \frac{1}{32\pi^2 F_0^2} \bar{\chi} \ln \frac{\bar{\chi}}{\Lambda^2} + \frac{4}{F_0^2} (4L_{86} - L_{54}) \bar{\chi} \\
&\quad + \frac{4}{F_0^2} (2W - \tilde{W}) \rho \frac{\chi'_{\text{PCAC}}}{\bar{\chi}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
2B_0 m_\chi^{PCAC} &= \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{16}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86}) \rho^2 \frac{\chi'^3_0}{|\chi^*|^3} \\
&\quad + \frac{8}{F_0^2} (L_{54} - 4L_{86} - W_{54} + 2W_{86}) \rho^2 \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} \left(1 - \frac{\chi'^2_0}{|\chi^*|^2} \right) \\
&= \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \rho |\chi^*| (W_{86} - 2L_{86}) + \frac{16}{F_0^2} W' \rho^2 \frac{\chi'^3_0}{|\chi^*|^3} \\
&\quad + \frac{8}{F_0^2} (2W - \tilde{W}) \rho^2 \frac{\chi'_0}{|\chi^*|} \left(1 - \frac{\chi'^2_0}{|\chi^*|^2} \right) \\
|\chi^*| &= \frac{2B}{a} \sqrt{(a m_0 - a m_c)^2 + \left(\frac{a \mu}{Z_A} \right)^2}
\end{aligned}$$

Hierbei ist zu beachten, dass sich f_π und g_π aus \mathcal{L}_4 nur bis $\mathcal{O}(a)$ berechnen lassen. Terme proportional zu a^2 wären bereits von NNLO, also $\mathcal{O}(p^6)$, und werden an dieser Stelle nicht berücksichtigt.

Bis zur Ordnung $\mathcal{O}(a)$ ist es nicht möglich, den Wert von W_0 unabhängig von W und \tilde{W} zu bestimmen. Ohne Einschränkung lässt sich in dieser Ordnung also mit $W_0 \equiv 1$ arbeiten. Versucht man allerdings die vorliegenden Analysen auf den Fall bis $\mathcal{O}(a^2)$ auszudehnen, so zeigt sich, dass die Ergebnisse für die Parameter der Chiralen Störungstheorie nur eine schwache Abhängigkeit von der konkreten Wahl von W_0 haben. Andererseits ist es nötig, diesen Parameter während des Fits zu fixieren, um die Konvergenz nicht zu gefährden. Untersucht man nun eine gewisse Anzahl von Fits mit unterschiedlicher Wahl von W_0 aus dem Intervall $[0, 10]$, so findet man tatsächlich ein Minimum in der Nähe von Eins. Für die folgenden Auswertungen stellt die Wahl $W_0 = 1$ also eine gewisse Approximation dar. Allerdings sind die Unsicherheiten, die hierdurch entstehen, nicht sehr groß, da sowohl die Qualität des Fits als auch die Werte der Parameter nur sehr schwach von der Wahl von W_0 in der Nähe des Minimums abhängen.

Ein Vergleich mit den Fit-Ergebnissen bis $\mathcal{O}(a)$ zeigt nun eine erstaunlich gute Übereinstimmung im Bereich der Kontinuums-Parameter. Betrachtet man jedoch die NLO-Gitter-Korrekturen, so ergeben sich nicht zuletzt aufgrund der Approximation $W_0 \approx 1$, deutliche Abweichungen vom bisher beobachteten Verhalten. Allerdings bewegen sich die Werte dieser Koeffizienten durchaus in einem plausiblen Bereich, da diese bis $\mathcal{O}(a)$ ja schon mit erheblichen Unsicherheiten behaftet sind. Wirklich aussagekräftige Ergebnisse werden sich allerdings auch hier erst ergeben können, sobald die Genauigkeit der Gitter-QCD-Simulationen gesteigert wird.

	Dimensionslose Parameter
am_c	-1.00481 ± 0.00032
am'_c	-0.85580 ± 0.00029
L_{54}	0.00057 ± 0.00033
L_{86}	0.00052 ± 0.00013
α_{45}	0.72 ± 0.42
α_{6845}	0.60 ± 0.54
$\frac{\Lambda_3}{F_0}$	6.9 ± 3.7
$\frac{\Lambda_4}{F_0}$	15.1 ± 1.6
Δ	2160 ± 250

	Fitparameter in fm	Fitparameter in MeV
F_0	0.429 ± 0.030	84.7 ± 6.0
B	19.5 ± 1.1	3850 ± 220
B'	18.1 ± 1.6	3580 ± 320
$W W_0$	0.00053 ± 0.00011	4040 ± 880
$\tilde{W} W_0$	0.0130 ± 0.0035	100000 ± 28000
$W' W_0^2$	-0.00002 ± 0.00043	-200 ± 3400
$W'_2 W_0^2$	0.0045 ± 0.0016	35000 ± 13000

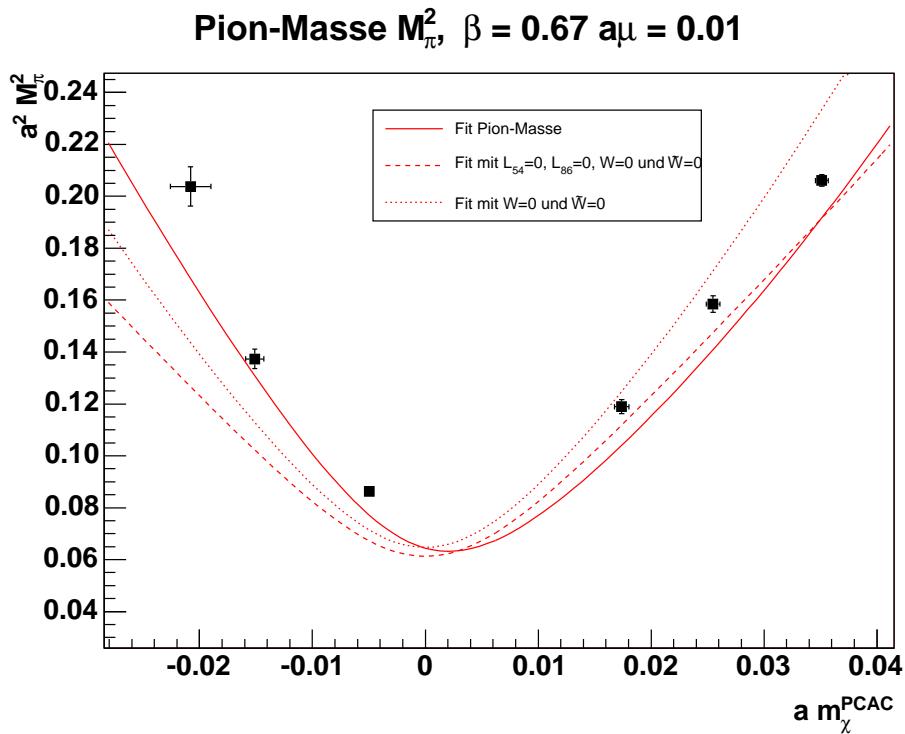


Abbildung 3.79: Fit Pion-Massenquadrat

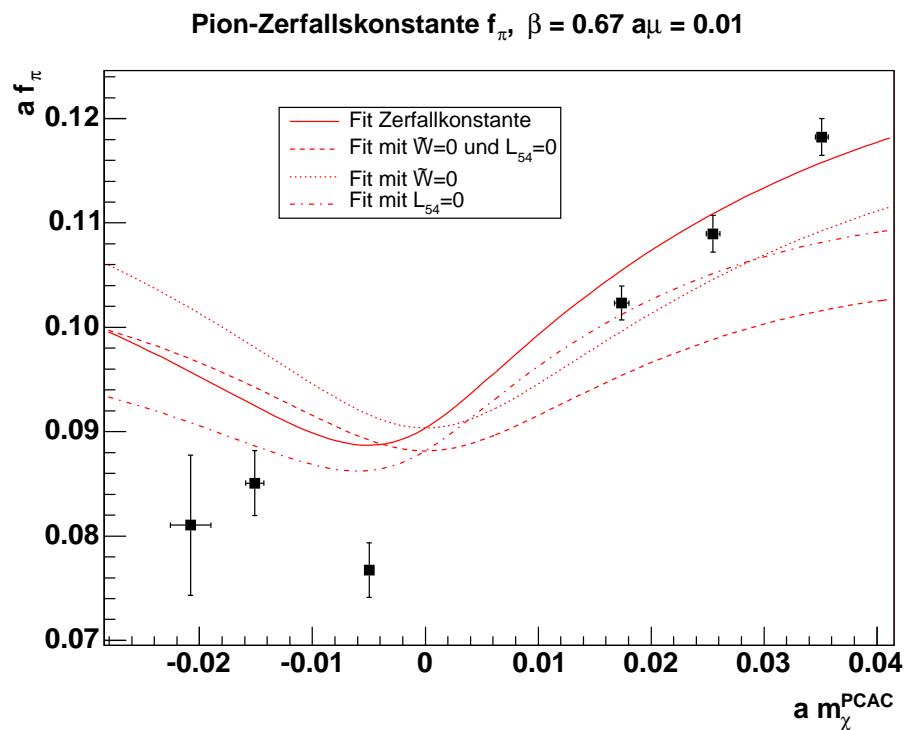


Abbildung 3.80: Fit Pion-Zerfallskonstante

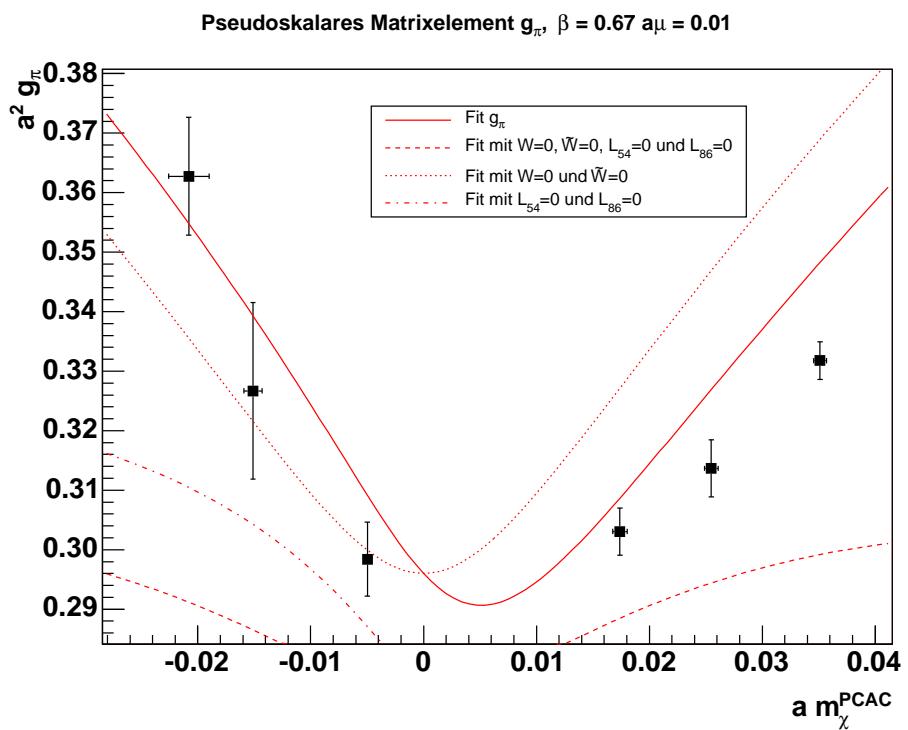


Abbildung 3.81: Fit pseudoskalares Matrixelement

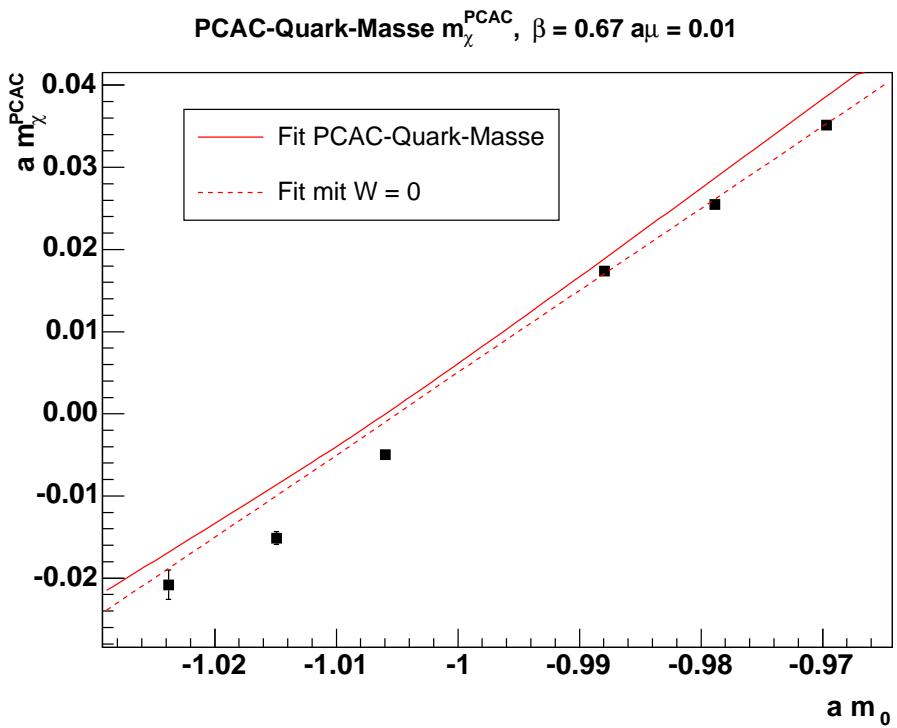


Abbildung 3.82: Fit PCAC-Quark-Masse

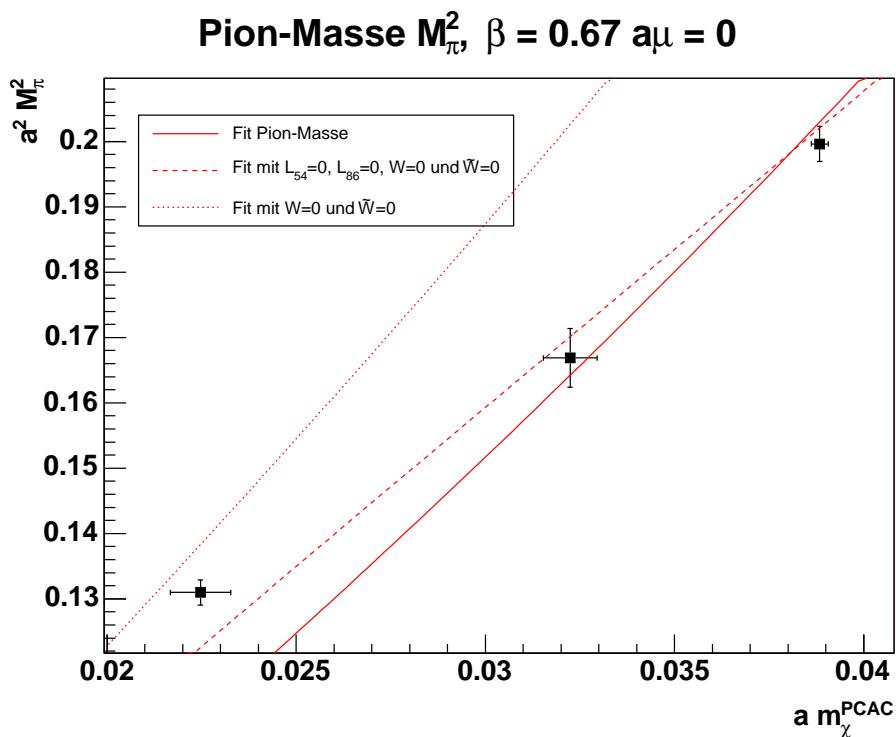


Abbildung 3.83: Fit Pion-Massenquadrat

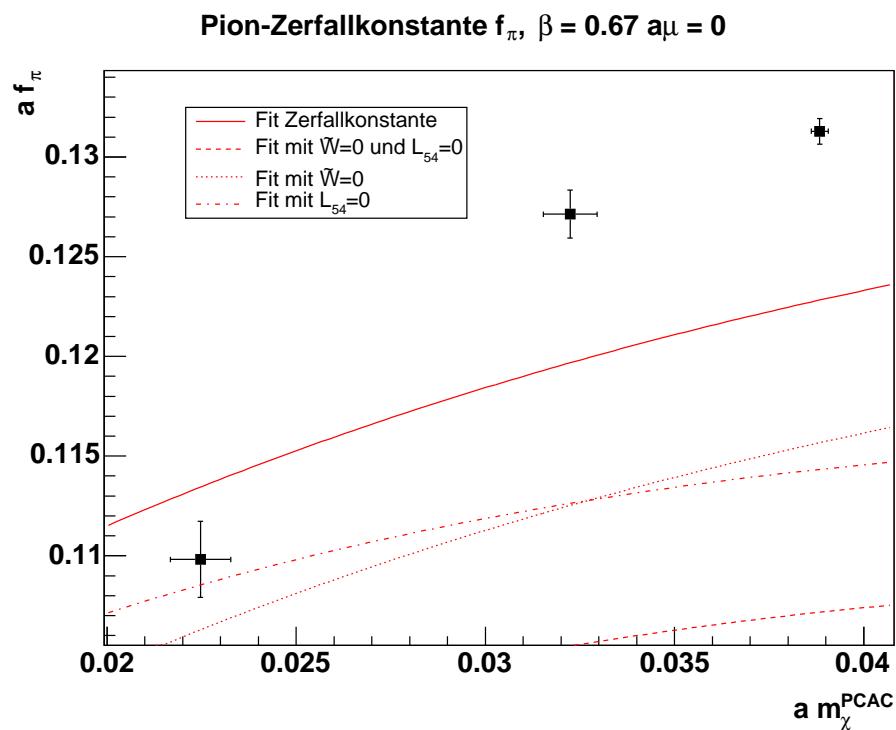


Abbildung 3.84: Fit Pion-Zerfallskonstante

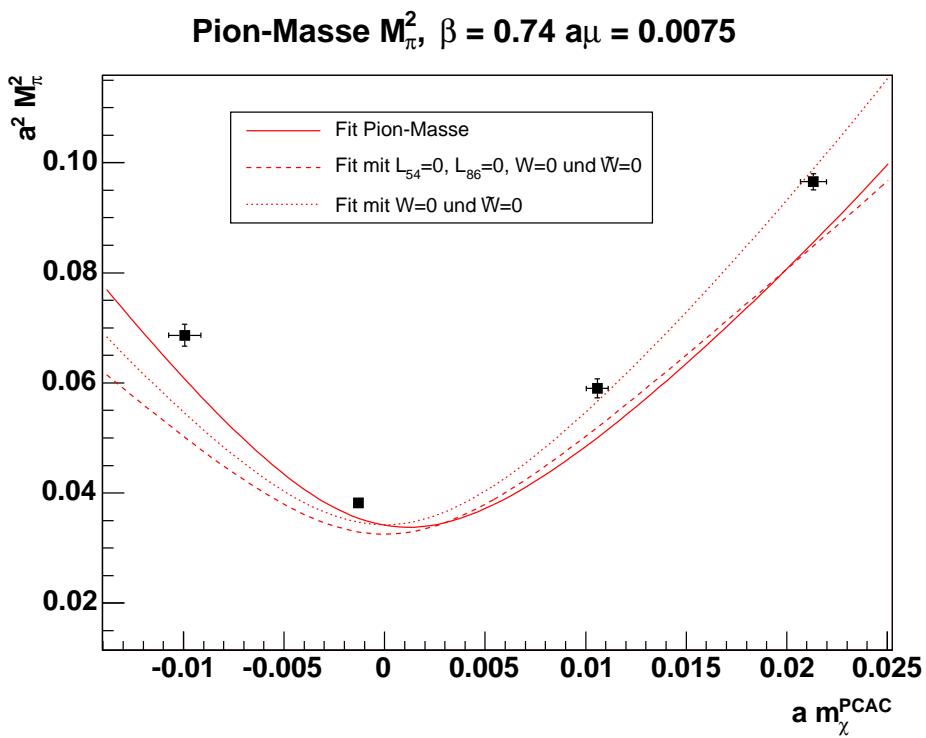


Abbildung 3.85: Fit Pion-Massenquadrate

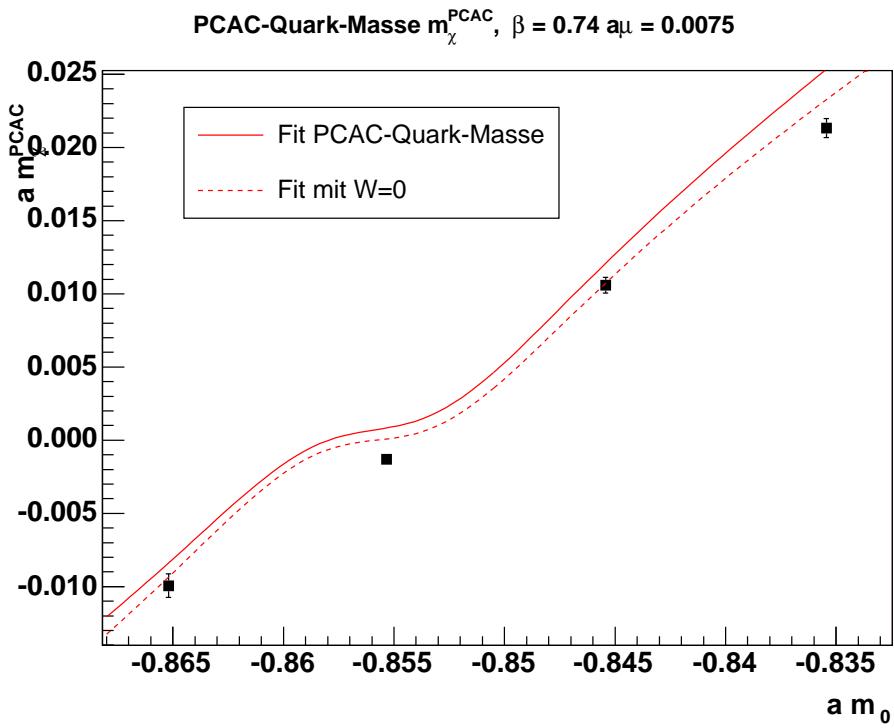


Abbildung 3.86: Fit PCAC-Quark-Masse

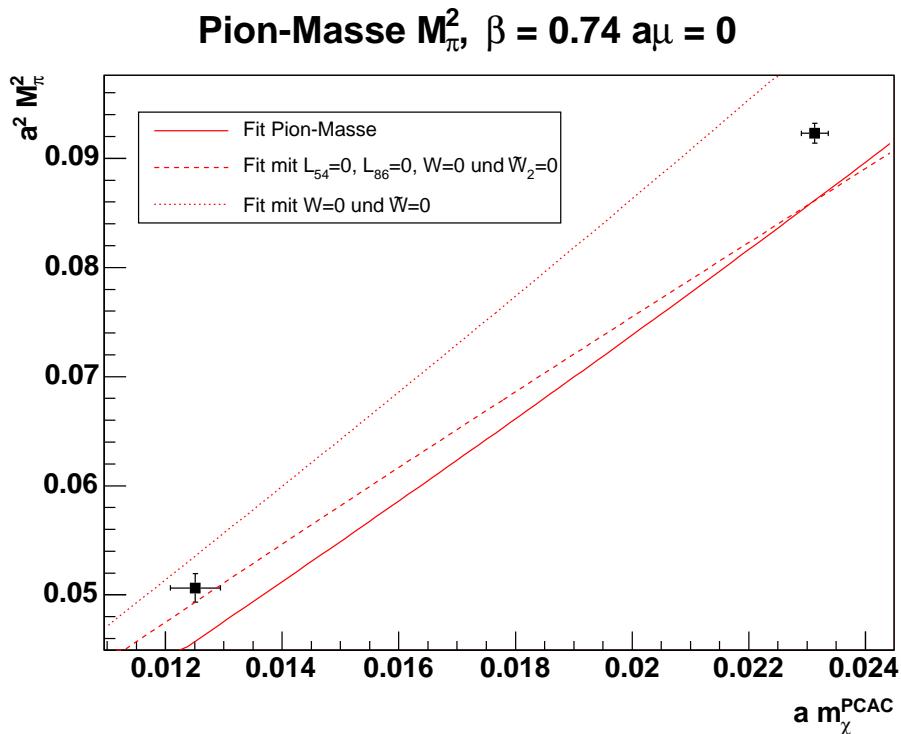


Abbildung 3.87: Fit Pion-Massenquadrat

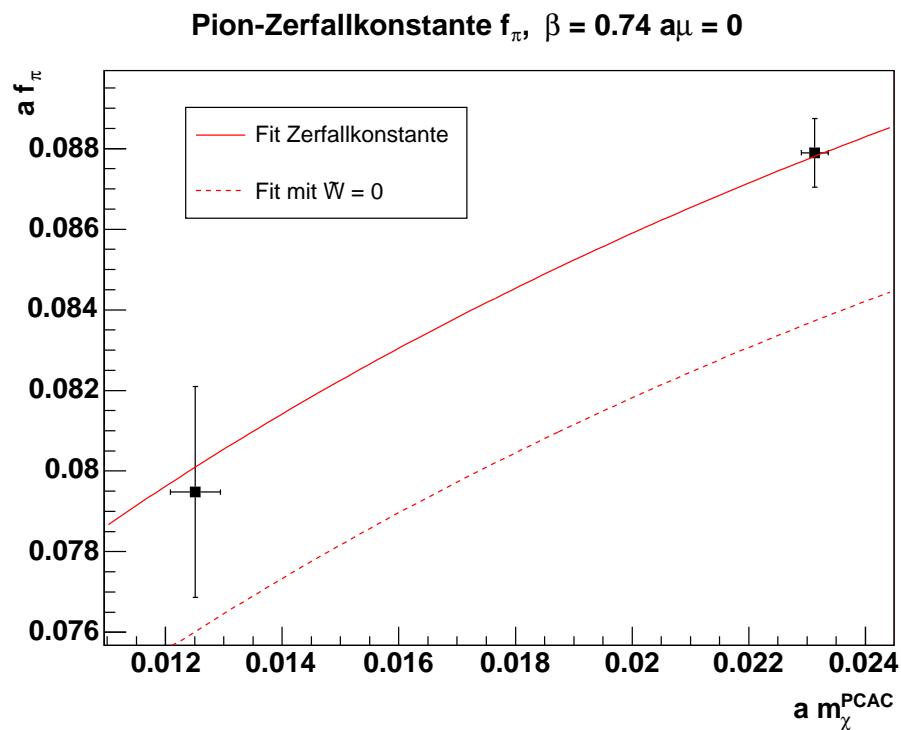


Abbildung 3.88: Fit Pion-Zerfallskonstante

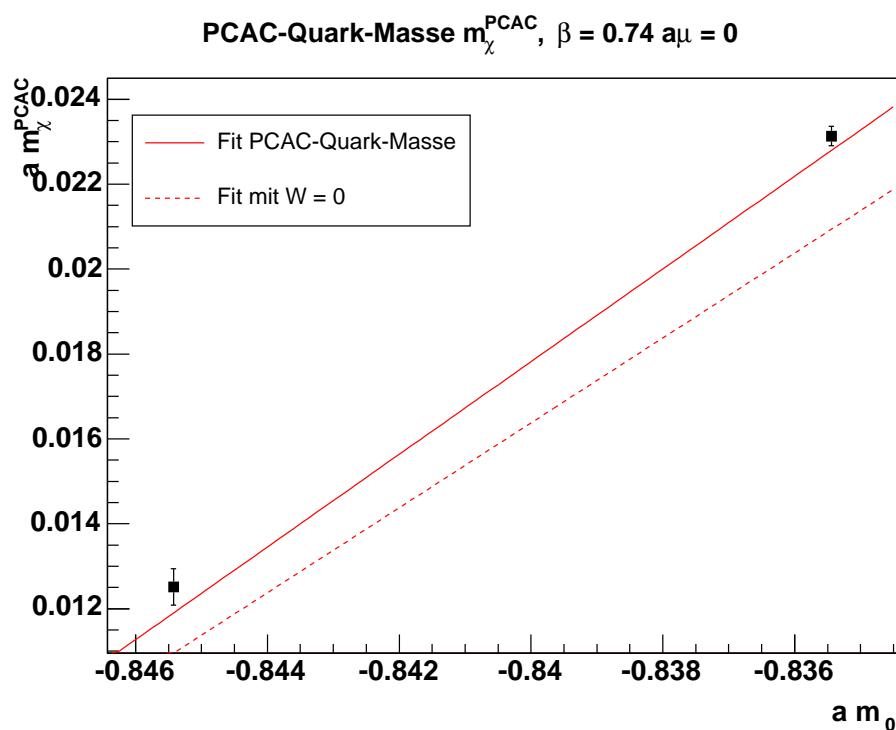


Abbildung 3.89: Fit PCAC-Quark-Masse

3.8 Zusammenfassung

Das Ziel der hier dargestellten Analysen ist eine möglichst präzise Bestimmung der Niederenergie-Koeffizienten aus den vorliegenden Simulationsdaten. Ein kombinierter Fit für zwei verschiedene Werte von β und damit auch von a ist möglich und liefert die besten Schätzwerte für die Parameter der Chiralen Störungstheorie. Verwendet man nun keinen festen Wert für Z_A , sondern lässt Z_A als freien Fit-Parameter zu, so kann man beobachten, dass die Ergebnisse nur geringe Abweichungen von den Resultaten einer direkten Berechnung aus den Monte-Carlo-Daten zeigen. Ein weiterer Konsistenz-Check ergibt sich aus dem Vergleich der Analysen unter Vernachlässigung negativer Quark-Massen. Im Rahmen der Unsicherheiten der einzelnen Größen zeigt sich auch hier eine zufriedenstellende Übereinstimmung der beiden verschiedenen Ansätze.

Abschließend lässt sich im Hinblick auf die Aussagekraft der hier durchgeföhrten Rechnungen also feststellen, dass sich die Kontinuums-Parameter der Chiralen Störungstheorie mit den oben geschilderten Methoden gut aus den Daten der Gitter-QCD-Simulationen extrahieren lassen. Um jedoch auch für die NLO-Gitter-Korrekturen, die durch W und \tilde{W} parametrisiert werden, verlässliche Vorhersagen machen zu können ist es nötig, mit einer deutlich größeren Zahl unabhängiger Datenpunkte zu arbeiten.

Interessant ist aber vor allem ein Vergleich der Fit-Resultate mit phänomenologischen Werten für die universellen Niederenergie-Skalen Λ_3 und Λ_4 . In den Arbeiten [22] wurden folgende Werte für die Λ_i aus experimentellen Daten extrahiert :

$$\Lambda_3 = 0.59_{-0.41}^{+1.40} \text{ GeV} \quad \text{und} \quad \frac{\Lambda_3}{F_0} = 6.4_{-4.5}^{+15.2} \quad (3.196)$$

$$\Lambda_4 = 1.25_{-0.13}^{+0.15} \text{ GeV} \quad \text{und} \quad \frac{\Lambda_4}{F_0} = 13.6_{-1.4}^{+1.6} \quad (3.197)$$

Es ist also festzustellen, dass die Ergebnisse einer Analyse der hier vorliegenden Gitter-QCD-Daten, trotz der noch großen Unsicherheiten, eine überraschend gute Übereinstimmung mit den phänomenologischen Werten zeigen.

Zur schnellen Übersicht sind alle wichtigen Ergebnisse der Analyse in den folgenden beiden Tabellen noch einmal zusammengefasst. Alle dimensionsbehafteten Größen sind hier in Einheiten von MeV angegeben.

Fit für alle Werte von $a m_\chi^{PCAC}$

	Input Z_A			Z_A gefittet		
	$\beta = 0.67$	$\beta = 0.74$	both β	$\beta = 0.67$	$\beta = 0.74$	both β
Z_A	0.952(30)	-	0.952(30)	0.8658(90)	-	0.852(14)
Z'_A	-	0.944(74)	0.944(74)	-	0.868(18)	0.909(31)
F_0	80.7(3.6)	68.6(5.2)	73.7(4.8)	78.9(3.2)	66.0(4.4)	72.0(3.0)
$B 10^{-3}$	3.20(13)	-	3.20(12)	3.09(10)	-	3.063(94)
$B' 10^{-3}$	-	3.31(30)	3.16(38)	-	3.12(19)	3.18(15)
$L_{54} 10^3$	0.98(26)	0.96(26)	1.17(28)	0.50(15)	0.80(23)	0.74(12)
$L_{86} 10^3$	0.78(13)	0.81(11)	0.94(14)	0.554(84)	0.76(10)	0.709(61)
$W_0 W 10^{-3}$	50(15)	-21(16)	18(17)	35(12)	-30(14)	6.6(8.0)
$W_0 \bar{W} 10^{-3}$	89(19)	21(38)	64(29)	62(14)	-9(22)	35(12)
α_{45}	1.23(32)	1.22(33)	1.48(35)	0.64(19)	1.00(28)	0.93(15)
α_{6845}	0.73(47)	0.83(43)	0.91(50)	0.76(28)	0.92(39)	0.86(22)
Λ_3 / F_0	6.1(2.8)	5.5(2.3)	5.1(2.5)	5.9(1.7)	5.0(2.0)	5.3(1.1)
Λ_4 / F_0	17.1(1.4)	17.0(1.4)	18.2(1.6)	14.74(69)	16.2(1.1)	16.86(59)
\mathcal{L}_{min}	268(74)	148(59)	510(280)	183(32)	127(26)	348(58)

Fit für positive Werte von $a m_\chi^{PCAC}$

	Input Z_A			Z_A gefittet		
	$\beta = 0.67$	$\beta = 0.74$	both β	$\beta = 0.67$	$\beta = 0.74$	both β
Z_A	0.952(30)	-	0.952(30)	0.888(10)	-	0.896(11)
Z'_A	-	0.944(74)	0.944(74)	-	0.910(18)	0.880(23)
F_0	80.3(3.4)	91.2(5.4)	83.9(4.4)	79.3(3.4)	89.9(4.2)	82.2(2.6)
$B 10^{-3}$	2.92(11)	-	2.95(11)	2.85(10)	-	2.864(84)
$B' 10^{-3}$	-	3.46(22)	3.52(38)	-	3.39(15)	3.39(11)
$L_{54} 10^3$	1.39(33)	1.04(53)	1.32(28)	0.86(17)	0.82(23)	0.80(13)
$L_{86} 10^3$	0.92(16)	0.71(20)	0.81(15)	0.70(11)	0.64(13)	0.649(77)
α_{45}	1.76(42)	1.31(66)	1.56(35)	1.08(21)	1.03(29)	1.01(17)
α_{6845}	0.58(58)	0.49(83)	0.49(52)	0.68(35)	0.60(44)	0.63(26)
Λ_3 / F_0	7.1(4.1)	7.7(6.4)	7.7(4.0)	6.4(2.2)	6.9(3.0)	6.7(1.7)
Λ_4 / F_0	19.5(2.0)	17.4(2.9)	18.6(1.6)	16.47(88)	16.3(1.2)	16.19(69)
\mathcal{L}_{min}	121(59)	16(39)	140(190)	77(22)	13(12)	99(36)

Kapitel 4

Partiell gequenchte Chirale Störungstheorie

In den partiell gequenchten Simulationen der QCD wird die Approximation der Fermion-Dämpfung verwendet. Da die Berechnung der Fermion-Determinanten bei realistischen up- und down-Quark-Massen extrem zeitaufwändig ist, wird für die dynamisch simulierten See-Quarks eine größere als die physikalische Masse verwendet. In den Propagatoren jedoch, die vergleichsweise einfach zu berechnen sind, wird dagegen mit den physikalischen Werten der Massen gearbeitet. Im Vergleich zu Simulationen ohne jedes Quenching ist es nun möglich, bei gleicher Rechenzeit sehr viel präzisere Ergebnisse zu erhalten. Der wichtigste Aspekt ist allerdings, dass in der partiell gequenchten Chiralen Störungstheorie die Niederenergie-Koeffizienten, im Gegensatz zum Fall des vollen Quenching, ihre physikalischen Werte annehmen. Damit ist es möglich, physikalische Ergebnisse, also Werte für die L_i und W_i , aus unphysikalischen Simulationen zu extrahieren. Je genauer die Werte dieser Parameter bekannt sind, desto präzisere Vorhersagen lassen sich mit Hilfe der Chiralen Störungstheorie über die Niederenergie-Struktur der QCD machen.

Die hier durchgeführte Berechnung der Massen der Pseudo-Goldstone-Bosonen im Rahmen der partiell gequenchten Chiralen Störungstheorie erfolgt im sogenannten physikalischen Grenzfall vergleichsweise kleiner Gitter-Artefakte $\frac{\rho}{\chi} \ll 1$. Nur in diesem Fall lässt sich die Position des Sattelpunkts des Potentials durch eine einfache Entwicklung in den Gitter-Korrekturen proportional zu a bestimmen. Bis auf die zusätzlich zu berücksichtigten Quark-Flavours entspricht die Herleitung der Ergebnisse deshalb den Rechnungen in der ungequenchten Theorie aus Kapitel 2. Aus diesem Grund werden im folgenden nur noch die speziell für die Arbeiten mit der partiell gequenchten Theorie relevanten Anmerkungen und Erläuterungen präsentiert.

4.1 Tree-Level Mesonen-Massen

4.1.1 Lagrange-Dichte

Die Lagrange-Dichte der partiell gequenchten Chiralen Störungstheorie hat formell die selbe Gestalt, wie die Lagrange-Dichte der vollen ungequenchten Theorie :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = & \frac{F_0^2}{4} \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle \\
& - L_1 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle^2 - L_2 \left\langle \partial_\mu U \partial_\nu U^\dagger \right\rangle^2 - L_3 \left\langle (\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger)^2 \right\rangle \\
& + L_4 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle + W_4 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle \\
& + L_5 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger (\chi U^\dagger + U \chi^\dagger) \right\rangle + W_5 \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger (\rho U^\dagger + U \rho^\dagger) \right\rangle \\
& - L_6 \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle^2 - W_6 \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle - W'_6 \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle^2 \\
& - L_7 \left\langle \chi U^\dagger - U \chi^\dagger \right\rangle^2 - W_7 \left\langle \chi U^\dagger - U \chi^\dagger \right\rangle \left\langle \rho U^\dagger - U \rho^\dagger \right\rangle - W'_7 \left\langle \rho U^\dagger - U \rho^\dagger \right\rangle^2 \\
& - L_8 \left\langle \chi U^\dagger \chi U^\dagger + U \chi^\dagger U \chi^\dagger \right\rangle - W_8 \left\langle \chi U^\dagger \rho U^\dagger + U \rho^\dagger U \chi^\dagger \right\rangle - W'_8 \left\langle \rho U^\dagger \rho U^\dagger + U \rho^\dagger U \rho^\dagger \right\rangle
\end{aligned} \tag{4.1}$$

Durch spitze Klammern wird aber nun die *Super-Spur* gekennzeichnet. Die $SU(4|2)$ -Matrix U wird parametrisiert durch :

$$U = \exp \left(\frac{i}{F_0} \Phi \right) \quad \text{mit} \quad s\text{Tr}\Phi = 0 \tag{4.2}$$

Für die Matrix der Goldstone-Bosonen-Felder Φ werden im folgenden zwei verschiedene Darstellungen verwendet. Im Rahmen der Tree-Level Berechnung der Pion-Massen erweist es sich als vorteilhaft, in der Basis der 35 Generatoren der $SU(4|2)$ zu arbeiten, womit Φ dargestellt wird durch :

$$\Phi = 2 \sum_{a=1}^{35} \pi_a T_a \tag{4.3}$$

Für die Loop-Rechnungen ist es jedoch günstiger, in der Quark-Basis zu arbeiten, in der Φ die Form :

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_{1,1} & \phi_{1,2} & \phi_{1,3} & \phi_{1,4} & \theta_{1,5} & \theta_{1,6} \\ \phi_{2,1} & \phi_{2,2} & \phi_{2,3} & \phi_{2,4} & \theta_{2,5} & \theta_{2,6} \\ \phi_{3,1} & \phi_{3,2} & \phi_{3,3} & \phi_{3,4} & \theta_{3,5} & \theta_{3,6} \\ \phi_{4,1} & \phi_{4,2} & \phi_{4,3} & \phi_{4,4} & \theta_{4,5} & \theta_{4,6} \\ \theta_{5,1} & \theta_{5,2} & \theta_{5,3} & \theta_{5,4} & \phi_{5,5} & \phi_{5,6} \\ \theta_{6,1} & \theta_{6,2} & \theta_{6,3} & \theta_{6,4} & \phi_{6,5} & \phi_{6,6} \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

hat, wobei es sich bei ϕ_{ij} um bosonische und bei θ_{ij} um fermionische Goldstone-Bosonen-Felder handelt.

Auch hier wird für die Berechnung der Massen der Goldstone-Bosonen in der Physical-Basis gearbeitet, in der die Massen- und die Gittermatrix folgende Gestalt haben :

$$\chi = 2B_0 \text{diag}(m_V, m_V, m_S, m_S, m_V, m_V) \tag{4.5}$$

$$\rho(\omega) = e^{i\omega\tau_3} \rho = \begin{pmatrix} \rho^V(\omega_V) & 0 & 0 \\ 0 & \rho^S(\omega_S) & 0 \\ 0 & 0 & \rho^G(\omega_V) \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

wobei die 2×2 -Matrizen ρ^X mit $X \in \{V, S, G\}$ verwendet werden mit :

$$\rho^X = \mathbf{1}_{2 \times 2} 2W_0 a \cos \omega_X + i\tau_3 2W_0 a \sin \omega_X \quad (4.7)$$

und

$$\chi_0^X = 2B_0 m_X \quad (4.8)$$

$$\rho_0^X = 2W_0 a \cos \omega_X \quad (4.9)$$

$$\rho_3^X = 2W_0 a \sin \omega_X \quad (4.10)$$

Die Verschiebung der Matrix der Goldstone-Bosonen-Felder U wird hier symmetrisch durchgeführt :

$$U = e^{\frac{i}{2F_0}(\phi_{min}\tau_3)} e^{\frac{i}{F_0}\Phi} e^{\frac{i}{2F_0}(\phi_{min}\tau_3)} \quad (4.11)$$

wobei zur Vereinfachung der Notation folgende Abkürzung verwendet wird :

$$\phi_{min}\tau_3 \equiv \sum_{X \in \{V, S, G\}} \phi_{min}^X \tau_3^X \quad (4.12)$$

mit der Position des Sattelpunkts ϕ_{min}^X im Raum der Goldstone-Bosonen-Felder und den erweiterten Pauli-Matrizen :

$$\tau_3^V = \begin{pmatrix} \tau_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3^S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3^G = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_3 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

4.1.2 Die Generatoren der $SU(4|2)$

Obwohl der Ansatz

$$\Phi = 2 \sum_{a=1}^{35} \pi_a T_a$$

für die Goldstone-Bosonen-Felder in der Parametrisierung der 35 Generatoren T_a der $SU(4|2)$ für die Tree-Level Rechnungen eine elegante Erweiterung der Rechnungen in der ungequenchten Theorie darstellt, so gibt es jedoch auch einige Probleme bei diesem Vorgehen. Die konkrete Wahl einer Menge von Generatoren gestaltet sich nämlich ausgesprochen schwierig, da es kaum möglich ist, die zufordernden Orthogonalitäts-Bedingungen :

$$s\text{Tr}(T_a T_b) = \delta_{ab} \quad (4.14)$$

auch tatsächlich zu erfüllen. Da auf Tree-Level die Kopplungen der physikalischen Felder an die unphysikalischen Geister jedoch nicht relevant sind, ergibt sich die Möglichkeit, auf Tree-Level mit einer Untermenge der T_a zu arbeiten, die nur die physikalischen Freiheitsgrade parametrisieren. Damit sind aber noch immer nicht alle Schwierigkeiten beseitigt. Für die Berechnung der Eigenschaften der Flavour-neutralen Goldstone-Bosonen-Felder, die auf der

Diagonalen von Φ liegen, benötigt man neben den drei erweiterten Pauli-Matrizen τ_3^X noch zwei weitere diagonale Generatoren der $SU(4|2)$. In [33] wird das Konstruktionsprinzip dieser Generatoren konkret angegeben :

$$T_{34} = \text{diag} \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1, -1 \right) \quad (4.15)$$

$$T_{35} = \text{diag} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0, 0 \right) \quad (4.16)$$

Ist man jedoch nur an den NLO-Massen der übrigen Goldstone-Bosonen bis $\mathcal{O}(a^2)$ interessiert, so kann man auf diese beiden zusätzlichen Generatoren in der Rechnung verzichten, da in der Lagrange-Dichte keine Mischungen mit den diagonalen Feldern auftreten.

Arbeitet man allerdings nur bis $\mathcal{O}(a)$, so stellt sich heraus, dass die durch die beiden zusätzlichen $SU(4|2)$ -Generatoren parametrisierten Mischungen der diagonalen Felder keine Rolle spielen. Diese Terme sind proportional zu ρ_3^2 und müssen als $\mathcal{O}(a^2)$ -Effekte in dieser Ordnung nicht berücksichtigt werden.

Aus Zeitgründen wird nun auf die Berechnung der Massen der Flavour-neutralen Goldstone-Bosonen verzichtet. Im Hinblick auf einen Vergleich der Mesonen-Massen mit den Ergebnissen der Monte-Carlo-Simulationen sind die Ergebnisse der ungeladenen Teilchen nur von untergeordneter Bedeutung. Da es numerisch vorteilhaft ist, die Eigenschaften der geladenen Bosonen zu simulieren, werden zunächst nur deren Massen in den Simulationen bestimmt. Deshalb ist es wichtiger, diese Massen im Rahmen der Chiralen Störungstheorie zu berechnen, was im folgenden explizit durchgeführt wird.

4.1.3 Bestimmung des Minimums des Potentials

Für die Berechnung der Massen wird zunächst die Lagrange-Dichte um den Sattelpunkt herum in den Feldern aus Φ entwickelt [33, 34]. In diesem Fall muss der in den Feldern lineare Anteil im Potential verschwinden, was auf folgende Gleichungen für die Position des Sattelpunkts ϕ_{min}^X im Raum der Goldstone-Bosonen-Felder führt :

$$\begin{aligned} 0 = & \left(16 \frac{\chi^V \rho_3^V W_8}{F_0^3} + 8 \frac{\chi^S \rho_3^V W_6}{F_0^3} + 32 \frac{\rho_0^V \rho_3^V W'_8}{F_0^3} + 16 \frac{\rho_0^S \rho_3^V W'_6}{F_0^3} + \frac{1}{2} \frac{\rho_3^V}{F_0} \right) (\phi_{min}^V)^2 \\ & + \left(\rho_0^V + 16 \frac{W_8 \chi^V \rho_0^V}{F_0^2} + \chi^V + 32 \frac{W'_6 \rho_0^S \rho_0^V}{F_0^2} + 16 \frac{\chi^V W_6 \rho_0^S}{F_0^2} + 32 \frac{W'_8 (\rho_0^V)^2}{F_0^2} - 16 \frac{\rho^2 W'_8}{F_0^2} \right. \\ & \quad \left. + 16 \frac{L_8 (\chi^V)^2}{F_0^2} + 32 \frac{L_6 \chi^S \chi^V}{F_0^2} + 16 \frac{W_6 \chi^S \rho_0^V}{F_0^2} \right) \phi_{min}^V \quad (4.17) \\ & + \left(32 \frac{W'_6 \rho_3^S \rho_0^V}{F_0^3} + 16 \frac{\rho_3^S \chi^V W_6}{F_0^3} \right) \phi_{min}^S \phi_{min}^V - \rho_3^V F_0 \\ & - 8 \frac{\chi^V \rho_3^V W_8}{F_0} - 16 \frac{\rho_0^V \rho_3^V W'_8}{F_0} - 16 \frac{\chi^S \rho_3^V W_6}{F_0} - 32 \frac{\rho_0^S \rho_3^V W'_6}{F_0} \\ & - 32 \frac{\phi_{min}^S \rho_3^S W'_6 \rho_3^V}{F_0^2} + \left(16 \frac{\rho_0^S \rho_3^V W'_6}{F_0^3} + 8 \frac{\chi^S \rho_3^V W_6}{F_0^3} \right) (\phi_{min}^S)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
0 = -\rho_3^S F_0 + \frac{(-32W'_6 - 16W'_8) \rho_0^S \rho_3^S}{F_0} + \frac{(-16W_6 - 8W_8) \chi^S \rho_3^S}{F_0} \\
+ \left(\chi^S + \frac{(64W'_6 + 32W'_8) (\rho_0^S)^2}{F_0^2} + \rho_0^S + \frac{(32W_6 + 16W_8) \chi^S \rho_0^S}{F_0^2} \right. \\
\left. + \frac{-32\rho^2 W'_6 - 16\rho^2 W'_8}{F_0^2} + \frac{(16L_8 + 32L_6) (\chi^S)^2}{F_0^2} \right) \phi_{min}^S \\
+ \left(\frac{1}{2} \frac{\rho_3^S}{F_0} + \frac{(32W_6 + 16W_8) \chi^S \rho_3^S}{F_0^3} + \frac{(64W'_6 + 32W'_8) \rho_0^S \rho_3^S}{F_0^3} \right) (\phi_{min}^S)^2
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Wie in der ungequenchten Theorie erfolgt die Verschiebung des Minimums nur in τ_3 -Richtung; hier also entsprechend den erweiterten Pauli-Matrizen in die τ_3^X -Richtung mit $X \in \{V, S, G\}$. Aus diesem Grund wird auch auf den Index „3“ in der Notation verzichtet. Die Position des Sattelpunkts ϕ_{min}^G für die Geister-Felder ist dabei identisch mit der Position im Fall der Valenz-Felder. Das Ergebnis lautet nun :

$$\begin{aligned}
\phi_{min}^V = \frac{F_0 \rho_3^V}{\chi^V} - \frac{\rho_3^V \rho_0^V F_0}{\chi^{V^2}} + \frac{(-32L_6 + 16W_6) \chi^S \rho_3^V}{\chi^V F_0} \\
+ \frac{(-32W_6 + 64L_6) \chi^S \rho_3^V \rho_0^V}{\chi^{V^2} F_0} + \frac{(32L_8 - 24W_8 + 16W'_8) \rho_3^V \rho_0^V}{\chi^V F_0} \\
+ \frac{(-16W_6 + 32W'_6) \rho_3^V \rho_0^S}{\chi^V F_0} + \frac{(-16L_8 + 8W_8) \rho_3^V}{F_0}
\end{aligned} \tag{4.19}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{min}^S = \frac{\rho_3^S F_0}{\chi^S} - \frac{\rho_3^S F_0 \rho_0^S}{\chi^{S^2}} + \frac{(32L_8 - 48W_6 + 32W'_6 + 64L_6 - 24W_8 + 16W'_8) \rho_3^S \rho_0^S}{\chi^S F_0} \\
+ \frac{(-16L_8 - 32L_6 + 8W_8 + 16W_6) \rho_3^S}{F_0}
\end{aligned} \tag{4.20}$$

4.1.4 Tree-Level Ergebnisse für die Goldstone-Bosonen-Massen

Die Tree-Level Ergebnisse für die Massen der Goldstone-Bosonen in der partiell gequenchten Chiralen Störungstheorie werden genauso berechnet, wie im ungequenchten Fall. Für ein Feld ϕ_{XY} mit dem Quark-Inhalt $X, Y \in \{V, S, G\}$ wird der entsprechende Anteil der Lagrangiendichte zunächst in folgender Form zusammengefasst :

$$\mathcal{L}_{XY} = \frac{A_{XY}}{2} (\partial_\mu \phi_{XY}(x))^2 + \frac{B_{XY}}{2} (\phi_{XY}(x))^2 \tag{4.21}$$

Hieraus ergibt sich nun die Tree-Level Masse durch Ausklammern von A_{XY} und anschließende Renormierung der Feldstärke :

$$\mathcal{L}_{XY} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi'_{XY}(x))^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{B_{XY}}{A_{XY}} \right) (\phi'_{XY}(x))^2 \tag{4.22}$$

Die Tree-Level Masse lässt sich jetzt sofort ablesen :

$$(M_{XY}^{tree})^2 = \frac{B_{XY}}{A_{XY}} \tag{4.23}$$

Entwickelt man nun die Lagrange-Dichte um den Sattelpunkt, so folgt für die Koeffizienten A_{XY} mit $X, Y \in \{V, S\}$ der kinetischen Terme der unterschiedlichen Felder :

$$A_{VV} = 1 + 16 \frac{\chi^S L_4}{F_0^2} + 8 \frac{\chi^V L_5}{F_0^2} + 16 \frac{W_4 \rho_0^S}{F_0^2} + 8 \frac{W_5 \rho_0^V}{F_0^2} + \frac{(-4L_5 + 8W_5) (\rho_3^V)^2}{\chi^V F_0^2} + \frac{(16W_4 - 8L_4) (\rho_3^S)^2}{\chi^S F_0^2} \quad (4.24)$$

$$A_{SS} = 1 + \frac{(8L_5 + 16L_4) \chi^S}{F_0^2} + \frac{(16W_4 + 8W_5) \rho_0^S}{F_0^2} + \frac{(16W_4 - 4L_5 - 8L_4 + 8W_5) (\rho_3^S)^2}{\chi^S F_0^2} \quad (4.25)$$

$$A_{VS} = 1 + \frac{(4L_5 + 16L_4) \chi^S}{F_0^2} + 4 \frac{\chi^V L_5}{F_0^2} + 4 \frac{W_5 \rho_0^V}{F_0^2} + \frac{(16W_4 + 4W_5) \rho_0^S}{F_0^2} + \frac{(-2L_5 + 4W_5) (\rho_3^V)^2}{\chi^V F_0^2} + \frac{(16W_4 - 2L_5 - 8L_4 + 4W_5) (\rho_3^S)^2}{\chi^S F_0^2} \quad (4.26)$$

Für die Koeffizienten B_{XY} der in den Feldern quadratischen Terme folgt :

$$B_{VV}^\pm = \chi^V + \rho_0^V + \frac{1}{2} \frac{(\rho_3^V)^2}{\chi^V} + 32 \frac{\chi^S \chi^V L_6}{F_0^2} + 16 \frac{(\chi^V)^2 L_8}{F_0^2} + 16 \frac{W_6 \chi^S \rho_0^V}{F_0^2} + 16 \frac{\chi^V W_6 \rho_0^S}{F_0^2} + 16 \frac{W_8 \chi^V \rho_0^V}{F_0^2} + 32 \frac{W'_6 \rho_0^S \rho_0^V}{F_0^2} + 16 \frac{W'_8 (\rho_0^V)^2}{F_0^2} + \frac{(-16L_8 + 16W_8) (\rho_3^V)^2}{F_0^2} + \frac{(-16L_6 + 16W_6) \chi^S (\rho_3^V)^2}{F_0^2 \chi^V} + \frac{(-16L_6 + 16W_6) \chi^V (\rho_3^S)^2}{\chi^S F_0^2} \quad (4.27)$$

$$B_{SS}^\pm = \chi^S + \rho_0^S + \frac{1}{2} \frac{(\rho_3^S)^2}{\chi^S} + \frac{(16L_8 + 32L_6) (\chi^S)^2}{F_0^2} + \frac{(16W_8 + 32W_6) \chi^S \rho_0^S}{F_0^2} + \frac{(16W'_8 + 32W'_6) (\rho_0^S)^2}{F_0^2} + \frac{(-32L_6 + 32W_6 + 16W_8 - 16L_8) (\rho_3^S)^2}{F_0^2} \quad (4.28)$$

$$B_{VS} = \frac{1}{2} \chi^S + \frac{1}{2} \chi^V + \frac{1}{2} \rho_0^V + \frac{1}{2} \rho_0^S + \frac{1}{4} \frac{(\rho_3^S)^2}{\chi^S} + \frac{1}{4} \frac{(\rho_3^V)^2}{\chi^V} + 4 \frac{L_8 (\chi^V)^2}{F_0^2} + \frac{(4L_8 + 16L_6) (\chi^S)^2}{F_0^2} + \frac{(8L_8 + 16L_6) \chi^S \chi^V}{F_0^2} + 4 \frac{W_8 \chi^V \rho_0^V}{F_0^2} + \frac{(8W_6 + 4W_8) \chi^S \rho_0^V}{F_0^2} + \frac{(8W_6 + 4W_8) \rho_0^S \chi^V}{F_0^2} + \frac{(16W_6 + 4W_8) \chi^S \rho_0^S}{F_0^2} + \frac{(16W'_6 + 8W'_8) \rho_0^S \rho_0^V}{F_0^2} + 4 \frac{W'_8 (\rho_0^V)^2}{F_0^2} + \frac{(16W'_6 + 4W'_8) (\rho_0^S)^2}{F_0^2} + \frac{(-8L_6 + 4W_8 + 8W_6 - 4L_8) \chi^S (\rho_3^V)^2}{F_0^2 \chi^V} + \frac{(-8L_6 + 4W_8 + 8W_6 - 4L_8) (\rho_3^S)^2 \chi^V}{\chi^S F_0^2} + \frac{(-8L_8 - 16L_6 + 8W_8 + 16W_6 - 4W'_8) (\rho_3^S)^2}{F_0^2} + \frac{(8W_8 - 8L_8 - 4W'_8) (\rho_3^V)^2}{F_0^2} + \frac{(-8W'_8 + 8W_8 - 8L_8) \rho_3^S \rho_3^V}{F_0^2} \quad (4.29)$$

Durch „ \pm “ wird gekennzeichnet, dass es sich bei den betrachteten Feldern um geladene Goldstone-Bosonen handelt. Die Tree-Level Massen ergeben sich damit zu A_{XY}/B_{XY} :

$$\begin{aligned} (M_{VV}^{\pm})^2 &= \chi^V + \rho_0^V + \frac{1}{2} \frac{(\rho_3^V)^2}{\chi^V} + \frac{(16L_8 - 8L_5)(\chi^V)^2}{F_0^2} + \frac{(32L_6 - 16L_4)\chi^S\chi^V}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{(-8W_5 + 16W_8 - 8L_5)\chi^V\rho_0^V}{F_0^2} + \frac{(16W_6 - 16L_4)\chi^S\rho_0^V}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{(16W_6 - 16W_4)\chi^V\rho_0^S}{F_0^2} + \frac{(32W'_6 - 16W_4)\rho_0^S\rho_0^V}{F_0^2} + \frac{(16W'_8 - 8W_5)(\rho_0^V)^2}{F_0^2} \quad (4.30) \\ &\quad + \frac{(-8W_5 + 16W_8 - 16L_8)(\rho_3^V)^2}{F_0^2} + \frac{(-8L_4 - 16L_6 + 16W_6)\chi^S(\rho_3^V)^2}{F_0^2\chi^V} \\ &\quad + \frac{(16W_6 + 8L_4 - 16L_6 - 16W_4)\chi^V(\rho_3^S)^2}{\chi^SF_0^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (M_{SS}^{\pm})^2 &= \chi^S + \rho_0^S + \frac{1}{2} \frac{(\rho_3^S)^2}{\chi^S} + \frac{(-16L_4 - 8L_5 + 16L_8 + 32L_6)(\chi^S)^2}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{(16W_8 + 32W_6 - 16L_4 - 16W_4 - 8W_5 - 8L_5)\chi^S\rho_0^S}{F_0^2} \quad (4.31) \\ &\quad + \frac{(32W'_6 + 16W'_8 - 16W_4 - 8W_5)(\rho_0^S)^2}{F_0^2} \\ &\quad + \frac{(-8W_5 - 16L_8 - 16W_4 - 32L_6 + 32W_6 + 16W_8)(\rho_3^S)^2}{F_0^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_{VS}^2 = & \frac{1}{2}\chi^S + \frac{1}{2}\chi^V + \frac{1}{2}\rho_0^S + \frac{1}{2}\rho_0^V + \frac{1}{4}\frac{(\rho_3^S)^2}{\chi^S} + \frac{1}{4}\frac{(\rho_3^V)^2}{\chi^V} \\
& + \frac{(-8L_4 + 4L_8 - 2L_5 + 16L_6)(\chi^S)^2}{F_0^2} + \frac{(4L_8 - 2L_5)(\chi^V)^2}{F_0^2} \\
& + \frac{(-4L_5 - 8L_4 + 8L_8 + 16L_6)\chi^S\chi^V}{F_0^2} + \frac{(4W_8 - 2L_5 - 2W_5)\chi^V\rho_0^V}{F_0^2} \\
& + \frac{(-2W_5 - 2L_5 + 8W_6 - 8L_4 + 4W_8)\chi^S\rho_0^V}{F_0^2} \\
& + \frac{(-2W_5 - 8W_4 + 8W_6 - 2L_5 + 4W_8)\rho_0^S\chi^V}{F_0^2} \\
& + \frac{(-2W_5 + 4W_8 - 8L_4 - 8W_4 - 2L_5 + 16W_6)\chi^S\rho_0^S}{F_0^2} \\
& + \frac{(-4W_5 + 8W'_8 - 8W_4 + 16W'_6)\rho_0^V\rho_0^S}{F_0^2} + \frac{(4W'_8 - 2W_5)(\rho_0^V)^2}{F_0^2} \\
& + \frac{(4W'_8 - 2W_5 - 8W_4 + 16W'_6)(\rho_0^S)^2}{F_0^2} + \frac{(-8W'_8 + 8W_8 - 8L_8)\rho_3^S\rho_3^V}{F_0^2} \\
& + \frac{(-8W_4 + 4L_4 - 8L_6 - 4L_8 + 8W_6 - 2W_5 + 4W_8)(\rho_3^S)^2\chi^V}{\chi^S F_0^2} \\
& + \frac{(-2W_5 - 8L_8 + 8W_8 + 16W_6 - 8W_4 - 4W'_8 - 16L_6)(\rho_3^S)^2}{F_0^2} \\
& + \frac{(-4W'_8 - 2W_5 + 8W_8 - 8L_8)(\rho_3^V)^2}{F_0^2} \\
& + \frac{(-4L_4 - 8L_6 - 2W_5 - 4L_8 + 8W_6 + 4W_8)\chi^S(\rho_3^V)^2}{F_0^2\chi^V}
\end{aligned} \tag{4.32}$$

4.2 Loop-Rechnungen

Zu den Ergebnissen in $\mathcal{O}(p^4)$ tragen neben den Tree-Level Resultaten aus \mathcal{L}_4 auch Loop-Korrekturen aus \mathcal{L}_2 bei. Es stellt sich jedoch heraus, dass eine direkte Berechnung der Loop-Integrale in dimensioneller Regularisierung nicht notwendig ist, sondern sich das Ergebnis durch eine Substitution direkt aus dem Kontinuums-Resultat ergibt.

4.2.1 Loop-Beiträge zu den Massen

Rechnet man in der Quark-Basis, so ist zusätzlich das Feld Φ_0 in der Lagrange-Dichte zu berücksichtigen :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_2 = & \frac{F_0^2}{4} \left\langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \right\rangle - \frac{F_0^2}{4} \left\langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \right\rangle + \alpha (\partial_\mu \Phi_0)^2 - M_0^2 \Phi_0^2
\end{aligned} \tag{4.33}$$

mit $M_0 \approx \Lambda_{QCD}$ [33]. Der kinetische Term für das Feld Φ_0 hat hier keine Bedeutung und kann weggelassen werden.

Kontinuum

Im Kontinuum, also mit $\rho = 0$, erhält man [33, 34] folgende Loop-Beiträge zu den Massen der Goldstone-Bosonen :

$$M_{SS,cont}^{Loop^2} = \frac{\chi_0^S}{32\pi^2 F_0^2} \log\left(\frac{\chi_0^S}{\Lambda^2}\right) \quad (4.34)$$

$$M_{VV,cont}^{Loop^2} = \frac{\chi_0^V}{32\pi^2 F_0^2} \left\{ \chi_0^V - \chi_0^S + (2\chi_0^V - \chi_0^S) \log\left(\frac{\chi_0^V}{\Lambda^2}\right) \right\} \quad (4.35)$$

$$M_{VS,cont}^{Loop^2} = \frac{\chi_0^V}{64\pi^2 F_0^2} (\chi_0^V + \chi_0^S) \log\left(\frac{\chi_0^V}{\Lambda^2}\right) \quad (4.36)$$

Gitter-Rechnungen

Um die Gitter-Rechnungen in der Quark-Basis möglichst einfach zu gestalten, wurden die Fähigkeiten von *Maple* zur Arbeit mit Grassmann-wertigen Variablen genutzt, wobei das Paket *Grassmann* von E.S. Cheb-Terrab (www.scg.uwaterloo.ca/~ecterrab/) verwendet wurde. Durch die sehr große Zahl von Termen, die im partiell gequenchten Fall auftreten, war es notwendig, die Rechnungen zu automatisieren. Genauso wie im ungequenchten Fall, werden die Rechnungen drastisch vereinfacht, wenn man die Verschiebung der Matrix U um den Sattelpunkt symmetrisch parametrisiert :

$$U = e^{\frac{i}{2F_0}(\phi_{min}\tau_3)} e^{\frac{i}{F_0}\Phi} e^{\frac{i}{2F_0}(\phi_{min}\tau_3)} \quad (4.37)$$

Entwickelt man nun die Lagrange-Dichte \mathcal{L}_2 mit $\rho \neq 0$ in den Feldern und berücksichtigt alle Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ erkennt man, dass das Ergebnis die gleiche Form hat, wie im Kontinuum. In diesem Fall tritt dabei die LO-Masse $m_{0,cont}^{XY^2}$ auf mit $X, Y \in \{V, S, G\}$:

$$m_{0,cont}^{XY^2} = \chi_0^X + \chi_0^Y \quad (4.38)$$

Auf dem Gitter erhält man jedoch bis $\mathcal{O}(a^2)$ das LO-Ergebnis

$$m_{0,lattice}^{XY^2} = \chi_0^X + \chi_0^Y + \rho_0^X + \rho_0^Y + \frac{\rho_3^{X^2}}{2\chi_0^X} + \frac{\rho_3^{Y^2}}{2\chi_0^Y} \quad (4.39)$$

Der einzige Unterschied der in den Feldern entwickelten Lagrange-Dichten auf dem Gitter und im Kontinuum ist nun das Auftreten von $m_{0,cont}^{XY^2}$ beziehungsweise von $m_{0,lattice}^{XY^2}$. Damit geht also das Gitter-Ergebnis nach der Substitution $m_{0,lattice}^{XY^2} \rightarrow m_{0,cont}^{XY^2}$ in das Kontinuums-Resultat über. Der Beweis dieser Aussage erfolgt durch explizite Subtraktion der beiden Ergebnisse, wobei sich wie erwartet der Wert Null ergibt. Durch diese Substitution folgt damit bereits das Ergebnis für die Loop-Beiträge zu den Massen :

$$M_{SS,lattice}^{Loop^2} = \frac{m_{0,lattice}^{SS^2}}{32\pi^2 F_0^2} \log\left(\frac{m_{0,lattice}^{SS^2}}{\Lambda^2}\right) \quad (4.40)$$

$$M_{VV,lattice}^{Loop^2} = \frac{m_{0,lattice}^{VV^2}}{32\pi^2 F_0^2} \left\{ m_{0,lattice}^{VV^2} - m_{0,lattice}^{SS^2} + (2m_{0,lattice}^{VV^2} - m_{0,lattice}^{SS^2}) \log\left(\frac{m_{0,lattice}^{VV^2}}{\Lambda^2}\right) \right\}$$

(4.41)

$$M_{VS,lattice}^{Loop^2} = \frac{m_{0,lattice}^{VV^2}}{64\pi^2 F_0^2} \left(m_{0,lattice}^{VV^2} + m_{0,lattice}^{SS^2} \right) \log \left(\frac{m_{0,lattice}^{VV^2}}{\Lambda^2} \right) \quad (4.42)$$

Und explizit ergibt sich :

$$M_{SS,lattice}^{Loop^2} = \frac{\left(\chi_0^S + \rho_0^S + \frac{\rho_3^{S^2}}{2\chi_0^S} \right)^2}{32\pi^2 F_0^2} \log \left(\frac{\chi_0^S + \rho_0^S + \frac{\rho_3^{S^2}}{2\chi_0^S}}{\Lambda^2} \right) \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} M_{VV,lattice}^{Loop^2} &= \frac{\chi_0^V + \rho_0^V + \frac{\rho_3^{V^2}}{2\chi_0^V}}{32\pi^2 F_0^2} \left\{ \chi_0^V + \rho_0^V + \frac{\rho_3^{V^2}}{2\chi_0^V} - \chi_0^S - \rho_0^S - \frac{\rho_3^{S^2}}{2\chi_0^S} \right. \\ &\quad \left. + \left(2 \left[\chi_0^V + \rho_0^V + \frac{\rho_3^{V^2}}{2\chi_0^V} \right] - \chi_0^S - \rho_0^S - \frac{\rho_3^{S^2}}{2\chi_0^S} \right) \log \left(\frac{\chi_0^V + \rho_0^V + \frac{\rho_3^{V^2}}{2\chi_0^V}}{\Lambda^2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} M_{VS,lattice}^{Loop^2} &= \frac{\chi_0^V + \rho_0^V + \frac{\rho_3^{V^2}}{2\chi_0^V}}{64\pi^2 F_0^2} \left(\chi_0^V + \rho_0^V + \frac{\rho_3^{V^2}}{2\chi_0^V} + \chi_0^S + \rho_0^S + \frac{\rho_3^{S^2}}{2\chi_0^S} \right) \\ &\quad \times \log \left(\frac{\chi_0^V + \rho_0^V + \frac{\rho_3^{V^2}}{2\chi_0^V}}{\Lambda^2} \right) \end{aligned} \quad (4.45)$$

4.3 NLO-Mesonen-Massen bis $\mathcal{O}(a^2)$

Da die Loop-Beiträge zu den Massen der Goldstone-Bosonen für geladene und ungeladene Teilchen identisch sind, folgt schließlich mit

$$(M_{XY}^{loop})^2 \equiv (M_{XY,lattice}^{loop})^2$$

für die NLO-Massen bis $\mathcal{O}(a^2)$:

$$(M_{VV}^0)^2 = (M_{VV}^{tree 0})^2 + (M_{VV}^{loop})^2 \quad (4.46)$$

$$(M_{VV}^\pm)^2 = (M_{VV}^{tree \pm})^2 + (M_{VV}^{loop})^2 \quad (4.47)$$

$$(M_{SS}^0)^2 = (M_{SS}^{tree 0})^2 + (M_{SS}^{loop})^2 \quad (4.48)$$

$$(M_{SS}^\pm)^2 = (M_{SS}^{tree \pm})^2 + (M_{SS}^{loop})^2 \quad (4.49)$$

$$(M_{VS})^2 = (M_{VS}^{tree})^2 + (M_{VS}^{loop})^2 \quad (4.50)$$

Zu berücksichtigen ist an dieser Stelle, dass es sich bei den Niederenergie-Koeffizienten L_i , W_i und W'_i , die hier auftreten, bereits um die renormierten handelt :

$$L_i^r = L_i + \frac{\Gamma_i}{32\pi^2} R \quad (4.51)$$

$$W_i^r = W_i + \frac{\Delta_i}{32\pi^2} R \quad (4.52)$$

$$W'^r_i = W'_i + \frac{\Delta'_i}{32\pi^2} R \quad (4.53)$$

mit

$$\begin{aligned} \Gamma_4 &= \frac{1}{8}, & \Gamma_5 &= \frac{2}{8}, & \Gamma_6 &= \frac{3}{32}, & \Gamma_8 &= 0 \\ \Delta_4 &= \frac{1}{8}, & \Delta_5 &= \frac{2}{8}, & \Delta_6 &= \frac{3}{16}, & \Delta_8 &= 0 \\ \Delta'_6 &= \frac{3}{32}, & \Delta'_8 &= 0 \end{aligned} \quad (4.54)$$

und

$$R = -\frac{2}{\epsilon} - [\log(4\pi) - \gamma + 1] \quad (4.55)$$

Das gesamte Renormierungsschema ist völlig analog zum ungequenchten Fall aus Kapitel 2. In den Ergebnissen für M_{XY}^{tree} sind also sämtliche Niederenergie-Koeffizienten durch ihre renormierten Werte L_i^r sowie W_i^r und W'^r_i zu ersetzen, wobei die funktionale Form der Resultate natürlich unverändert bleibt. Auch hier ergibt sich, wie bereits im ungequenchten Fall, dass sich sämtliche Divergenzen, aus den \mathcal{L}_2 -Loop-Beiträgen durch die oben dargestellte Renormierung der freien Parameter in \mathcal{L}_4 absorbieren lassen.

Diese Ergebnisse stimmen mit den bis $\mathcal{O}(a)$ angegebenen Resultaten aus [34] überein und liefern im Grenzfall $m_V = m_S$ und $\omega_V = \omega_S$ die Massen der ungequenchten Theorie aus Kapitel 2.

Als ein zukünftiges Projekt bietet sich an dieser Stelle die Berechnung der Tree-Level-Massen der flavour-neutralen Goldstone-Bosonen $M_{VV}^{tree,0}$ und $M_{SS}^{tree,0}$ an.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit ist es gelungen, einige wesentliche Aspekte der Chiralen Störungstheorie auf dem Gitter detailliert aufzuklären. Kapitel 2 gibt einen Überblick über die Ergebnisse für die Mesonen-Massen im Fall eines axial gedrehten Massenterms. Durch diesen Trick ergibt sich bei maximalem Twist automatisch ein $\mathcal{O}(a)$ -Improvement der Ergebnisse. Es konnten zusätzlich zu den bereits in [14] aufgeführten Resultaten nun auch $\mathcal{O}(a^2)$ -Korrekturen zu den Massen der Pionen berechnet werden. Diese Korrekturen stimmen mit den unabhängig hiervon berechneten Resultaten von L. Scorzato [15] überein. Mit Hilfe dieser Ergebnisse wird es möglich, deutlich präzisere Auswertungen von Gitter-QCD Simulationen durchzuführen, da sämtliche Unsicherheiten durch die künstliche Diskretisierung der Raum-Zeit von Ordnung $\mathcal{O}(a^3)$ sind.

Kapitel 3 zeigt nun die direkte Anwendung der Ergebnisse der Chiralen Störungstheorie auf die Auswertung konkreter Simulationen der Gitter-QCD aus [35]. Zunächst wurde durch theoretische Untersuchungen sichergestellt, dass sich der Gültigkeitsbereich der Chiralen Störungstheorie auch tatsächlich auf die in der Simulation untersuchte Situation erstreckt. Nachdem diese Frage positiv beantwortet werden konnte, folgt eine detaillierte Beschreibung der Fit-Methoden, die zur Extraktion der Gasser-Leutwyler-Koeffizienten aus den Gitter-Daten dienen. Beginnend mit einfachen Analysen konnte die Komplexität der Fits immer weiter gesteigert werden, bis sich am Ende präzise Werte für die Niederenergie-Koeffizienten angeben lassen. Mit Hilfe der Kenntnis dieser Konstanten wird es nun möglich, immer präzisere Vorhersagen über die Niederenergiedynamik der QCD zu machen.

Allerdings sind im Verlauf der Auswertungen der Gitter-QCD Daten auch sehr deutlich die Beschränkungen der heute verfügbaren Rechenkapazitäten zu Tage getreten. Obwohl die hier betrachteten Simulationen auf Höchstleistungs-Rechnern durchgeführt wurden, so war es unter Einhaltung einer sinnvollen Präzision der Ergebnisse nur möglich, mit einer sehr geringen Anzahl unabhängiger Datenpunkte zu arbeiten. Diese kleine Zahl der zur Verfügung stehenden Daten stellte für die Bestimmung der Gasser-Leutwyler-Koeffizienten die größte

theoretische Unsicherheit dar, da sich etablierte statistische Verfahren nicht sinnvoll anwenden ließen. Aus diesem Grund wurde die moderne und zuerst in [31, 32] geschilderte Methode der Generalized-Nonlinear-Least-Squares zunächst deutlich erweitert und anschließend auf die Auswertung der Gitter-QCD Simulationen angewendet. Die Ergebnisse dieser Analysen zeigen jedoch, dass sich zwar die Kontinuums-Koeffizienten der Chiralen Störungstheorie präzise aus den vorliegenden Daten extrahieren lassen, die Resultate für Gitter-Korrekturen aber noch mit sehr großen Unsicherheiten behaftet sind. Eine genauere Bestimmung der Größe dieser Diskretisierungsartefakte wird aber erst möglich werden, wenn eine deutlich größere Zahl unabhängiger Datenpunkte zur Verfügung steht.

Genau diese notwendige Steigerung der Präzision und Menge der verfügbaren Simulationsergebnisse wird durch Rechnungen in der partiell gequenchten Approximation möglich. Da die wesentliche Hürde aller Simulationen dynamischer Fermion-Systeme die kleine Masse der betrachteten Teilchen darstellt, wird in der partiell gequenchten QCD die zeitaufwändige Berechnung der Fermion-Determinante mit unphysikalisch großen Quark-Massen durchgeführt. Durch die Anwendung der Chiralen Störungstheorie für die partiell gequenchte Gitter QCD wird es nun jedoch möglich, aus diesen unrealistischen Simulationen physikalische Ergebnisse zu gewinnen. Ebenso wie im Fall ohne Quenching, ergibt sich auch hier ein $\mathcal{O}(a)$ -Improvement der Observablen bei maximalem Twist-Winkel. Aus diesem Grund wurden die zuerst in [34] berechneten Ergebnisse für die Massen der geladenen Pseudo-Goldstone-Bosonen bis zur Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ erweitert. Mit diesen Gleichungen lassen sich nun, unter weitgehender Berücksichtigung der Diskretisierungsartefakte, in einem zukünftigen Projekt auch Simulationen in der partiell gequenchten Approximation auswerten. Im Vergleich zu Rechnungen ohne Quenching erreichen sie bei gegebener Präzision der Ergebnisse in etwa die zehnfache Ausführungsgeschwindigkeit, wodurch sich auch die Größe der Gasser-Leutwyler-Koeffizienten sehr viel besser quantifizieren lassen wird als bisher.

Anhang A

Konventionen

A.1 Einheiten

Wie in der Elementarteilchen Physik üblich, wird auch in dieser Arbeit mit natürlichen Einheiten gearbeitet, in denen Zeiten und Längen gleichberechtigt sind :

$$c = \hbar = 1 \quad (\text{A.1})$$

Damit erhalten Zeiten die Dimension einer Länge, und Energien sowie Impulse erhalten die Dimension einer Masse. Das Produkt aus Länge und Masse hat also die Dimension Eins :

$$[x] = [t] = [m]^{-1} = [p]^{-1} = [E]^{-1} \quad (\text{A.2})$$

Auf dem Gitter ist die natürliche Längenskala fm, wobei folgende Umrechnung verwendet wird :

$$\hbar c = 197.326968(17) \text{ MeV fm} \quad (\text{A.3})$$

A.2 Summenkonvention

In Anlehnung an die Einstein'sche Notation wird der Übersichtlichkeit halber auch hier eine Summenkonvention benutzt. Überall dort, wo Indizes doppelt vorkommen, ist eine geeignete Summation durchzuführen. Mit den griechischen Indizes μ und ν werden die Komponenten eines Vierervektors im Euklidischen- oder im Minkowski-Raum bezeichnet. In allen anderen Fällen ist dem Kontext zu entnehmen, in welchen Grenzen die Summation durchzuführen ist.

A.3 Spur und Superspur einer Matrix

Da die Spur und die Superspur einer Matrix A im Zusammenhang mit der Chiralen Störungstheorie häufig auftauchen, wird der Übersichtlichkeit halber die Abkürzung :

$$\mathrm{Tr}A = \langle A \rangle \quad \text{und} \quad \mathrm{sTr}A = \langle A \rangle \quad (\text{A.4})$$

verwendet. Verwechslungen können bei dieser Notation aber nicht auftreten, da niemals Spur und Superspur gleichzeitig verwendet werden; Im Rahmen der partiell gequenchten Rechnungen wird nur die Superspur verwendet, bei Rechnungen im ungequenchten Fall nur die Spur einer Matrix.

Anhang B

Die $SU(N)$ -Generatoren

Als $SU(N)$ bezeichnet man die Gruppe der komplexen, unitären $N \times N$ -Matrizen mit Determinante Eins. Das bedeutet, sie haben die Eigenschaften :

$$\det A = 1 \quad \text{und} \quad A^\dagger A = AA^\dagger = 1 \quad (\text{B.1})$$

B.1 Die Generatoren der $SU(2)$

Die $SU(2)$ lässt sich parametrisieren durch drei Generatoren, mit der üblichen Wahl :

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Diese drei Matrizen werden auch als Pauli-Matrizen bezeichnet und haben folgende Eigenschaften :

$$\tau_i \tau_j = \delta_{ij} \mathbf{1}_{2 \times 2} + i \epsilon_{ijk} \tau_k \quad (\text{B.3})$$

$$\text{Tr}(\tau_i) = 0 \quad (\text{B.4})$$

$$\text{Tr}(\tau_i \tau_j) = 2 \delta_{ij} \quad (\text{B.5})$$

$$\text{Tr}(\tau_i \tau_j \tau_k) = 2 \epsilon_{ijk} \quad (\text{B.6})$$

$$\text{Tr}(\tau_i \tau_j \tau_k \tau_l) = 2 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \delta_{ik} \delta_{jl}) \quad (\text{B.7})$$

Bezüglich des Kommutators bilden die $SU(2)$ -Generatoren eine Lie-Algebra :

$$\left[\frac{\tau_i}{2}, \frac{\tau_j}{2} \right] = i \epsilon_{ijk} \frac{\tau_k}{2} \quad (\text{B.8})$$

mit den charakteristischen Strukturkonstanten ϵ_{ijk} .

B.2 Die Generatoren der SU(3)

Die Generatoren der SU(3) lassen sich wählen als :

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{B.9}$$

Bezüglich des Kommutators bilden die auch als Gell-Mann Matrizen bezeichneten Generatoren der SU(3) eine Lie-Algebra :

$$\left[\frac{\lambda_i}{2}, \frac{\lambda_j}{2} \right] = i f_{ijk} \frac{\lambda_k}{2}\tag{B.10}$$

mit den Strukturkonstanten f_{ijk} , die folgende Werte besitzen :

$$\begin{aligned}f_{123} &= 1 \\ f_{458} &= f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2} \\ f_{147} &= f_{246} = f_{345} = f_{257} = -f_{156} = -f_{367} = \frac{1}{2}\end{aligned}\tag{B.11}$$

Alle anderen Strukturkonstanten f_{ijk} besitzen den Wert Null.

Anhang C

Dirac-Matrizen

Da in dieser Arbeit durchgehend in der Euklidischen Formulierung der Quantenfeldtheorie gearbeitet wird, folgt nun eine kurze Übersicht der wichtigsten Relationen für den Zusammenhang der Dirac-Matrizen im Euklidischen mit denen im Minkowski-Raum

$$\gamma_j^{(E)} = -i\gamma_j^{(M)} \quad \text{mit} \quad j \in \{1, 2, 3\} \quad (\text{C.1})$$

$$\gamma_4^{(E)} = -i\gamma_4^{(M)} = \gamma_0^{(M)} \quad (\text{C.2})$$

verknüpft. Im folgenden wird nur noch im Euklidischen gerechnet, so dass auf den Index „E“ verzichtet werden kann. Die Dirac-Matrizen erfüllen nun folgende Relationen :

$$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu \quad \text{mit} \quad \mu \in \{1, 2, 3, 4\} \quad (\text{C.3})$$

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu} \mathbf{1}_{4 \times 4} \quad \text{und} \quad \gamma_\mu^2 = \mathbf{1}_{4 \times 4} \quad (\text{C.4})$$

Zusätzlich ist es sinnvoll, eine fünfte Matrix γ_5 einzuführen, die definiert wird über :

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \quad (\text{C.5})$$

Weitere nützliche Beziehungen zwischen den Dirac-Matrizen sind :

$$\gamma_5^2 = \mathbf{1}_{4 \times 4} \quad (\text{C.6})$$

$$\gamma_5 = \gamma_5^\dagger \quad (\text{C.7})$$

$$\{\gamma_\mu, \gamma_5\} = 0 \quad (\text{C.8})$$

Da der Kommutator zweier Dirac-Matrizen häufig auftaucht, wird dieser abgekürzt zu :

$$\sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] = i\gamma_\mu\gamma_\nu - i\delta_{\mu\nu}\mathbf{1}_{4 \times 4} \quad (\text{C.9})$$

Für die Spur von Produkten aus Dirac-Matrizen gilt :

$$\text{Tr}(\gamma_\mu\gamma_\nu) = 4\delta_{\mu\nu} \quad (\text{C.10})$$

$$\text{Tr}(\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_\rho\gamma_\tau) = 4(\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\tau} + \delta_{\mu\tau}\delta_{\nu\rho} - \delta_{\mu\rho}\delta_{\nu\tau}) \quad (\text{C.11})$$

Eine mögliche Wahl der Dirac-Matrizen, die alle oben aufgeführten Beziehungen erfüllt, ist :

$$\gamma_4 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{1}_{2 \times 2} \\ -\mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.12})$$

$$\gamma_j = \begin{pmatrix} 0 & -i\tau_j \\ i\tau_j & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad j \in \{1, 2, 3\} \quad (\text{C.13})$$

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (\text{C.14})$$

Anhang D

Renormierung

Aufgrund des chiralen Power-Countings ist sichergestellt, dass sich in jeder Ordnung der Chiralen Störungstheorie immer ein endliches Resultat ergibt. Divergenzen, die durch Ein-Loop-Beiträge aus \mathcal{L}_2 auftreten, werden durch eine Renormierung der Gasser-Leutwyler-Koeffizienten L_i , W_i und W'_i aus \mathcal{L}_4 absorbiert. Ein konsistentes Renormierungsschema, das auf alle Observablen anwendbar ist [6, 23], lautet :

$$L_i^r = L_i + \frac{\Gamma_i}{32\pi^2} R \quad (\text{D.1})$$

$$W_i^r = W_i + \frac{\Delta_i}{32\pi^2} R \quad (\text{D.2})$$

$$W'^r_i = W'_i + \frac{\Delta'_i}{32\pi^2} R \quad (\text{D.3})$$

mit der divergenten Konstante R , die bei dimensioneller Regularisierung in $4 - \epsilon$ Raum-Zeit-Dimensionen auftaucht :

$$R = -\frac{2}{\epsilon} - [\log(4\pi) - \gamma + 1] \quad (\text{D.4})$$

Für $N_f = 2$ haben die Renormierungs-Konstanten folgende Werte :

$$\begin{aligned} \Gamma_4 &= \frac{1}{8}, & \Gamma_5 &= \frac{2}{8}, & \Gamma_6 &= \frac{3}{32}, & \Gamma_8 &= 0 \\ \Delta_4 &= \frac{1}{8}, & \Delta_5 &= \frac{2}{8}, & \Delta_6 &= \frac{3}{16}, & \Delta_8 &= 0 \\ \Delta'_6 &= \frac{3}{32}, & \Delta'_8 &= 0 \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Anhang E

Renormierungsfaktoren auf dem Gitter

Der Zusammenhang der Gitter-Größen mit den Parametern aus der Chiralen Störungstheorie wurde von I. Wetzorke zusammengestellt und wird hier zur Referenz im Original gezeigt :

bare lattice quantities	renormalized quantities
$m_{\chi(1)}^{PCAC} = \frac{\langle \partial A P \rangle}{2 \langle P P \rangle}$ $m_{\chi(2)}^{PCAC} = \frac{f_{\pi,\chi} m_\pi^2}{2 g_\pi}$	$m_{R,\chi(1)}^{PCAC} = \frac{Z_A}{Z_P} m_{\chi(1)}^{PCAC}$ $m_{R,\chi(2)}^{PCAC} = \frac{Z_A}{Z_P} m_{\chi(2)}^{PCAC}$
$m_{(\mu)}^{PCAC} = \frac{\mu}{\sin \hat{\omega}}$	$m_{R,(\mu)}^{PCAC} = \frac{1}{Z_P} m_{(\mu)}^{PCAC}$
$m^{PCAC} = \frac{1}{\cos \hat{\omega}} m_\chi^{PCAC}$	$m_R^{PCAC} = \frac{1}{\cos \hat{\omega}} m_{R,\chi}^{PCAC}$ $\equiv \frac{Z_A}{Z_P} m^{PCAC}$
$f_{\pi,\chi}^{(A)} = \frac{1}{m_\pi} \langle 0 A_0^{local} \pi \rangle$ $f_{\pi,\chi}^{(V)} = \frac{1}{m_\pi} \langle 0 V^{local} \pi \rangle$ $f_{\pi,\chi}^{(V_c)} = \frac{1}{m_\pi} \langle 0 V^{cons} \pi \rangle$	
$f_\pi^{(A)} = \frac{1}{\cos \hat{\omega}} f_{\pi,\chi}^{(A)}$ $f_\pi^{(V)} = \frac{1}{\sin \hat{\omega}} f_{\pi,\chi}^{(V)}$ $f_\pi^{(V_c)} = \frac{1}{\sin \hat{\omega}} f_{\pi,\chi}^{(V_c)}$	$f_{\pi R} = Z_A f_\pi^{(A)} \equiv f_\pi$ $f_{\pi R} = Z_V f_\pi^{(V)} \equiv f_\pi$ $f_{\pi R} = f_\pi^{(V_c)} \equiv f_\pi \quad \text{since } Z_V = 1$
$g_\pi (\equiv f_P \quad \text{Sharpe-Wu} \quad)$	$g_{\pi R} = Z_P g_\pi$

$$\begin{aligned}
m_\pi^2 &= 2B_0 \sqrt{(m_{R,\chi}^{PCAC})^2 + \mu_R^2} & m_{R,\chi}^{PCAC} &= \frac{Z_A}{Z_P} m_\chi^{PCAC} \\
&= 2B_0 \frac{Z_A}{Z_P} \sqrt{(m_\chi^{PCAC})^2 + \frac{1}{Z_A^2} \mu_R^2} & \mu_R &= \frac{1}{Z_P} \mu \\
&= 2B_{fit} \sqrt{(m_\chi^{PCAC})^2 + \frac{1}{Z_A^2} \mu_R^2}
\end{aligned}$$

Anhang F

Datensatz

Der gesamte hier verwendete Datensatz wurde mir von F. Farchioni zur Verfügung gestellt und ist im Original abgedruckt. Da der Datenpunkt bei $\beta = 0.67$ und $\kappa = 1.665$ mit erheblichen statistischen Problemen behaftet ist, wird dieser Punkt in den hier durchgeföhrten Analysen nicht verwendet, was konsistent ist mit dem Vorgehen in [35].

DBW2 (TSMB) $12^3 \times 24$ lattice, $\beta = 0.67$, $\mu = 0$

κ	N_{conf}	r_0/a	am_π	am_ρ	m_π/m_ρ	r_0m_π	$(r_0m_\pi)^2$
0.1650	4514	2.305(36)	0.4468(30)	0.7025(44)	0.6359(51)	1.030(19)	1.061(38)
0.1655	2590	2.391(56)	0.4085(55)	0.7007(79)	0.5831(66)	0.977(23)	0.954(44)
0.1660	2589	2.351(27)	0.3619(27)	0.629(10)	0.5747(84)	0.850(11)	0.724(19)
0.1665	1721	2.652(38)	0.235(12)	0.595(22)	0.396(18)	0.623(30)	0.389(37)

κ	am_χ^{PCAC}	$r_0m_\chi^{PCAC}$	aF_π	r_0F_π	a^2g_π
0.1650	0.03884(22)	0.0895(14)	0.18567(90)	0.4279(62)	0.4760(31)
0.1655	0.03224(71)	0.0771(18)	0.1798(17)	0.4301(98)	0.4651(31)
0.1660	0.02247(80)	0.0528(20)	0.1553(27)	0.3653(75)	0.4481(58)
0.1665	0.00972(43)	0.0258(11)	0.1369(65)	0.363(18)	0.383(14)

DBW2, $\beta = 0.67$, $\mu = 0.01$

κ	$\omega_V/\pi^{(1)}$	$\omega_A/\pi^{(2)}$	$\hat{\omega}/\pi^{(3)}$	$Z_A/Z_V^{(4)}$	$Z_V^{(5)}$	$Z_V^{(6)}$	$Z_A^{(7)}$
0.1650	0.1352(13)	0.0564(17)	0.0883(13)	1.589(26)	0.5910(13)	0.5810(16)	0.939(15)
0.1655	0.1772(29)	0.0771(27)	0.1190(25)	1.587(28)	0.5813(11)	0.5761(25)	0.923(16)
0.1660	0.2412(62)	0.1069(41)	0.1661(54)	1.649(28)	0.5766(12)	0.5708(38)	0.951(16)
0.1665	0.411(12)	0.229(17)	0.334(17)	1.979(68)	0.5689(10)	0.5657(39)	1.126(39)
0.1670	0.678(12)	0.622(16)	0.647(11)	0.815(58)	0.5705(14)	0.5666(46)	0.465(33)
0.1675	0.8053(86)	0.826(13)	0.8137(80)	1.087(47)	0.5716(32)	0.5688(38)	0.623(27)
0.1680	0.8709(43)	0.843(23)	0.857(11)	0.894(78)	0.5851(33)	0.5754(43)	0.518(46)

κ	$a m_{(\mu)}^{PCAC}$	$a f_\pi^{(V_c)}$	$a^2 g_\pi$	$a m_\pi$	$a m_\chi^{PCAC}$
0.1650	0.03652(53)	0.1672(25)	0.4692(45)	0.4540(24)	0.03801(63)
0.1655	0.02739(55)	0.1541(25)	0.4436(68)	0.3981(40)	0.02791(65)
0.1660	0.02006(59)	0.1447(23)	0.4286(56)	0.3449(40)	0.01846(99)
0.1665	0.01154(11)	0.1192(18)	0.4026(56)	0.2793(26)	0.00505(82)
0.1670	0.01117(38)	0.1085(37)	0.4220(88)	0.2937(32)	-0.0109(2)
0.1675	0.01810(69)	0.1203(44)	0.462(21)	0.3706(50)	-0.0252(18)
0.1680	0.0230(17)	0.1146(95)	0.513(14)	0.4514(84)	-0.0409(17)

DBW2 (HMC) $16^3 \times 32$ lattice, $\beta = 0.74$, $\mu = 0$

κ	N_{conf}	r_0/a	am_π	am_ρ	m_π/m_ρ	r_0m_π	$(r_0m_\pi)^2$
0.1580	1319	3.563(33)	0.3038(15)	0.5256(37)	0.5780(41)	1.082(11)	1.172(23)
0.1585	419	3.741(90)	0.2250(29)	0.491(14)	0.457(13)	0.843(22)	0.711(36)

κ	am_χ^{PCAC}	$r_0m_\chi^{PCAC}$	aF_π	r_0F_π	a^2g_π
0.1580	0.02313(23)	0.0824(10)	0.1243(12)	0.4429(58)	0.2481(17)
0.1585	0.01251(43)	0.0469(24)	0.1124(37)	0.420(22)	0.2271(34)

DBW2, $\beta = 0.74$, $\mu = 0.0075$

κ	$\omega_V/\pi^{(1)}$	$\omega_A/\pi^{(2)}$	$\hat{\omega}/\pi^{(3)}$	$Z_A/Z_V^{(4)}$	$Z_V^{(5)}$	$Z_V^{(6)}$	$Z_A^{(7)}$
0.1580	0.1542(26)	0.0722(38)	0.1076(31)	1.508(35)	0.6379(12)	0.6315(32)	0.963(22)
0.1585	0.2613(66)	0.1393(96)	0.1963(77)	1.515(59)	0.6294(11)	0.6294(38)	0.953(37)
0.1590	0.532(12)	0.582(37)	0.5544(92)	1.65(45)	0.62595(95)	0.6241(38)	1.04(28)
0.1597	0.7966(49)	0.790(15)	0.794(12)	0.972(73)	0.6291(25)	0.6242(40)	0.612(46)

κ	$a m_{(\mu)}^{PCAC}$	$a f_\pi^{(V_c)}$	$a^2 g_\pi$	$a m_\pi$	$a m_\chi^{PCAC}$
0.1580	0.02262(45)	0.1170(25)	0.2525(25)	0.3107(24)	0.02247(33)
0.1585	0.01297(44)	0.0999(26)	0.2268(34)	0.2429(36)	0.01093(49)
0.1590	0.007611(38)	0.0874(15)	0.1961(19)	0.1954(22)	-0.00120(18)
0.1595	0.01245(61)	0.0867(39)	0.2621(31)	0.2620(38)	-0.01635(66)

Determination of $\mu_{\kappa cr}$:

Action	β	μ	$\mu_{\kappa cr}(\omega_V^+)$	$\mu_{\kappa cr}(m_\chi^{PCAC} +)$	$\mu_{\kappa cr}(\omega_V^-)$	$\mu_{\kappa cr}(m_\chi^{PCAC} -)$
DBW2	0.67	0.01	2.99800(9)	2.99839(12)	3.00059(13)	3.00043(17)
DBW2	0.74	0.0075	3.145528(52)	3.145645(22)	3.145441(52)	3.145435(21)
Wilson	5.2	0.01	2.903778(65)			
Wilson	5.3	0.008	2.984400(56)	2.984377(57)	2.993895(87)	2.994187(84)

Full-twist extrapolations $\omega_V^+ = \pi/2$ (from positive m_χ^{PCAC} ; for DBW2, $\beta = 0.67$ point $\kappa = 0.1665$ omitted):

Action	β	μ	$Z_V^{(5)}$	Z_A/Z_V	Z_A	$Z_{oV}^{(8)}$	$Z_S/Z_P^{(9)}$
DBW2	0.67	0.01	0.5650(10)	1.683(52)	0.952(30)	1.438(33)	0.854(46)
DBW2	0.74	0.0075	0.6217(23)	1.52(12)	0.944(74)	1.328(36)	0.874(93)
Wilson	5.2	0.01	0.5228(51)	1.771(59)	0.929(33)	0.450(14)	0.254(16)
Wilson	5.3	0.008	0.5621(46)	1.57(12)	0.884(70)	0.472(34)	0.301(23)

Zero quark-mass extrapolations $m_{(\mu)}^{PCAC} = 0$ (from positive m_χ^{PCAC} ; for DBW2, $\beta = 0.67$ point $\kappa = 0.1665$ omitted; for Wilson, $\beta = 5.3$ point $\kappa = 0.16715$ omitted):

Action	β	μ	r_0/a	a (fm)	$a f_\pi^{(V_c)}$	$f_\pi^{(V_c)} r_0$
DBW2	0.67	0.01	2.680(68)	0.1866(72)	0.1171(59)	0.314(24)
DBW2	0.74	0.0075	4.11(13)	0.1216(39)	0.0726(25)	0.298(20)
Wilson	5.2	0.01	3.48(12)	0.1437(50)	0.1124(77)	0.391(40)
Wilson	5.3	0.008	4.19(15)	0.1193(43)	0.0487(82)	0.204(42)

$$(1) \tan \omega_V = -i \frac{\sum_{\vec{x}} \langle V_{x0}^+ P_y^- \rangle}{\sum_{\vec{x}} \langle A_{x0}^+ P_y^- \rangle}$$

$$(2) \tan \omega_A = \frac{i \sum_{\vec{x},i} \langle A_{xi}^+ V_{yi}^- \rangle + \tan \omega_V \sum_{\vec{x},i} \langle A_{xi}^+ A_{yi}^- \rangle}{\sum_{\vec{x},i} \langle V_{xi}^+ V_{yi}^- \rangle - i \tan \omega_V \sum_{\vec{x},i} \langle V_{xi}^+ A_{yi}^- \rangle}$$

$$(3) \text{Rotation angle defined by}$$

$$\hat{V}_{x\mu}^a = Z_V V_{x\mu}^a \cos \hat{\omega} + \epsilon_{ab} Z_A A_{x\mu}^b \sin \hat{\omega} ,$$

$$\hat{A}_{x\mu}^a = Z_A A_{x\mu}^a \cos \hat{\omega} + \epsilon_{ab} Z_V V_{x\mu}^b \sin \hat{\omega}$$

where $\hat{V}_{x\mu}^a$, $\hat{A}_{x\mu}^a$ are the physical currents. $\tan \hat{\omega} = \sqrt{\tan \omega_V \tan \omega_A}$

- (4) From the relation $Z_A/Z_V = \sqrt{\tan \omega_V / \tan \omega_A}$
- (5) Direct determination from $Z_V = \frac{\sum_{\vec{x}} \langle V_{cx0}^+ P_y^- \rangle}{\sum_{\vec{x}} \langle V_{x0}^+ P_y^- \rangle}$
- (6) Indirect determination by the VWI for the conserved current: $Z_V = \frac{2\mu}{m_{PS}} \frac{\langle 0|P|\pi \rangle}{\langle 0|V|\pi \rangle}$
- (7) From (4) and (5)
- (8) From $\cot \omega_V = (\mu_\kappa - \mu_{\kappa cr})/(Z_{oV}\mu)$, $Z_{oV} = (Z_A Z_S)/(Z_V Z_P)$
- (9) From (4) and (8)

Literaturverzeichnis

- [1] K.G. Wilson, „*Confinement of quarks*”, Phys. Rev. **D10**, 2445 (1974)
- [2] A. Morel, „*Chiral logarithms in quenched QCD*”, J.Phys. **48**, 111 (1987)
- [3] C. Bernard and M. Goltermann, Phys. Rev. **D49** (1994) 486
- [4] K.G. Wilson, „*Quarks and strings on a lattice*”, in: New Phenomena in Subnuclear Physics, ed. A. Zichichi (Plenum Press, New York), Part A, p. 69. (1975)
- [5] S. Weinberg, Physica **A 96**, 327 (1979)
- [6] J. Gasser and H. Leutwyler, Ann. Phys. **158** (1984) 142.
- [7] S. L. Adler, „*Axial-vector vertex in spinor electrodynamics*”, Phys. Rev. **177**, 2426 (1969)
- [8] J.S. Bell und R. Jackiw, „*A PCAC puzzle: $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ in the sigma model*”, Nuovo Cim. **60A**, 47 (1967)
- [9] K. Symanzik, Nucl. Phys. **B226**, 187 (1983)
- [10] O.Bär, G.Rupak and N.Shores, „*Chiral perturbation theory at $O(a^2)$ for lattice QCD*”, Phys. Rev. **D70** (2004) 034508; [arXiv:hep-lat/0306021](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0306021)
- [11] R. Frezzotti *et. al.* „*Lattice QCD with a chirally twisted mass term*”, JHEP **0108** (2001) 058; [arXiv:hep-lat/0101001](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0101001)
- [12] F. Farchioni, C. Urbach, R. Frezzotti, K. Jansen, I. Montvay, G.C. Rossi, E.E. Scholz, A. Shindler, N. Ukita, I. Wetzorke „*Exploring the phase structure of lattice QCD with twisted mass quarks*”, Eur.Phys. J. **C39** (2005) 421-433; [arXiv:hep-lat/0406039](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0406039)
- [13] C. Schmidt, „*Chirale Störungstheorie für Quantenchromodynamik auf dem Gitter mit axial gedrehter Massenmatrix*”, Diplomarbeit Universität Münster (2004)
- [14] G. Münster, C.Schmidt, „*Chiral perturbation theory for lattice QCD with a twisted mass term*”, Europhys. Lett. **66** (2004) 652; [arXiv:hep-lat/0311032](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0311032)
- [15] L. Scorzato, „*Pion mass splitting and phase structure in Twisted Mass QCD*”, Eur. Phys. J. **C37** (2004) 445; [arXiv:hep-lat/0407023](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0407023)
- [16] S. Scherer, „*Introduction to Chiral Perturbation Theory*”, Mainz (2002)
- [17] G. Sterman, „*An Introduction to Quantum Field Theory*”, Cambridge University Press

- [18] T. Kugo, „*Eichtheorie*”, Springer Berlin (1997)
- [19] F. Farchioni, K. Jansen, I. Montvay, E. Scholz, L. Scorzato, A. Shindler, N. Ukita, C. Urbach, I. Wetzorke, „*The phase structure of lattice QCD with Wilson quarks and renormalization group improved gluons*”, Eur. Phys. J. **C42** (2005) 73; [arxiv:hep-lat/0410031](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0410031)
- [20] qq+q Collaboration, F.Farchioni, I.Montvay, E.Scholz, „*Quark mass dependence of pseudoscalar masses and decay constants on a lattice*”, Eur. Phys. J. **C39** (2005) 87–94; [arXiv:hep-lat/0403014](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0403014)
- [21] H. Leutwyler, „*Non-lattice determinations of the light quark masses*”, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **94** (2001) 108; [arXiv:hep-ph/0011049](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0011049)
- [22] M. Göckeler, „*Chiral extrapolations*”, (2004) [arXiv:hep-lat/0412013](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0412013)
- [23] qq+q Collaboration, F. Farchioni, C. Gebert, I. Montvay, E. Scholz, L. Scorzato, „*Partially quenched chiral perturbation theory and numerical simulations*”, Phys. Lett. **B561** (2003) 102-110; [arxiv:hep-lat/0302011](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0302011) (2003)
- [24] P.Hofmann, G. Münster, and L.Scorzato, „*Some Formulae for twisted mass lattice QCD from chiral perturbation theory*”, Interne Kommunikation (2005)
- [25] G. Münster, „*On the phase structure of twisted mass lattice QCD*”, JHEP **0409** (2004) 035; [arXiv:hep-lat/0407006](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0407006)
- [26] S. Sharpe and J. Wu, „*The phase diagram of twisted mass lattice QCD*”, Phys. Rev. **D 71** (2004) 094029, [arXiv:hep-lat/0407025](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0407025)
- [27] S. Sharpe and J. Wu, „*Twisted mass chiral perturbation theory at next-to-leading order*”, Phys. Rev. **D71** (2005) 074501; [arXiv:hep-lat/0411021](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0411021)
- [28] qq+q Collaboration, F. Farchioni, I. Montvay, E. Scholz and L. Scorzato, „*Quark mass dependence of masses and decay constants of the pseudo-Goldstone bosons in QCD*”, Eur. Phys. J. **31** (2003) 227; [arXiv:hep-lat/0307002](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0307002)
- [29] M. Lybanon, „*A better least-squares method when both variables have uncertainties*”, Am. J. Phys. **52**, 22-26 (1984).
- [30] M. Lybanon, „*Comment on 'Least-squares when both variables have uncertainties'*”, Am. J. Phys. **52**, 276-277 (1984)
- [31] S. Marshall, „*Generalized Least-Squares Parameter Estimation from Multiequation Implicit Models*”, AIChE J. **49**, 2577-2594 (2003)
- [32] S. Marshall and J. Blencoe, „*Generalized least-squares fit of multiequation models*”, Am. J. Phys. **73** (1), 69-82 (2005)
- [33] S. Sharpe, N. Shores, „*Partially quenched chiral perturbation theory without Φ_0* ”, Phys. Rev. **D61** (2001) 114510; [arXiv:hep-lat/0108003](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0108003)
- [34] G. Münster, C. Schmidt, E. Scholz, „*Chiral perturbation theory for partially quenched twisted mass lattice QCD*”, Europhys. Lett. **68** (2004) 639; [arXiv:hep-lat/0402003](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0402003)

- [35] F. Farchioni, P. Hofmann, G. Münster, K. Jansen, M. Papinutto, A. Shindler, U. Wenger, I. Wetzorke, I. Montvay, E. Scholz, N. Ukita, L. Scorzato, C. Urbach, „*Dynamical twisted mass fermions*”, PoS (LAT2005) 072; arXiv:hep-lat/0509131

Danksagung

An dieser Stelle bleibt mir die angenehme Aufgabe, mich bei allen Personen zu bedanken, die mich während meines Studiums und bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben. Ganz besonders danken möchte ich hier

- Herrn Prof. Dr. Gernot Münster für den ausgesprochen spannenden Themenvorschlag sowie für die viele Zeit, die er stets meinen Fragen und Problemen gewidmet hat,
- Tobias Sudmann für die unzähligen Gespräche über die Fundamente der Chiralen Störungstheorie und vor allem für das ausgezeichnete Team-Work bei der Berechnung der Pion-Massen,
- Dr. Federico Farchioni und Dr. Luigi Scorzato für die sehr gute Zusammenarbeit und die vielen hilfreichen Diskussionen über die QCD-Simulationen sowie die Einzelheiten der Fit-Prozedur,
- der Studienstiftung des deutschen Volkes für die finanzielle und vor allem für die ideelle Förderung während meines gesamten Studiums. Besondere Anerkennung verdient meine Referentin Frau Gabriele Kersting für ihre vielfältige Unterstützung.

Ein ganz besonderer Dank gilt meiner Familie, auf deren Unterstützung ich mich während meines Studiums stets verlassen konnte.

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

Münster, November 2005

