

CHRISTEL KAMP

**Untersuchung der Radiusverteilung in
einem Instantongas mit Hilfe analytischer
Methoden sowie großkanonischer
Monte-Carlo-Verfahren**

Institut für Theoretische Physik I
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

September 1999

**Untersuchung der Radiusverteilung in
einem Instantongas mit Hilfe analytischer
Methoden sowie großkanonischer
Monte-Carlo-Verfahren**

als Diplomarbeit vorgelegt von
Christel Kamp

September 1999

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Instantonen	3
1.1 Instantonen in der Quantenmechanik	3
1.1.1 Das Pfadintegral	3
1.1.2 Instantonen und Tunnelprozesse	5
1.1.3 Multi-Instantonlösungen und Tunnelprozesse	7
1.2 Instantonen in Eichtheorien	12
1.2.1 Homotopie und Windungszahl	14
1.2.2 Lösung der Feldgleichungen	17
1.2.3 Vakuum-Tunnelprozesse und θ -Vakuum	18
1.2.4 Die Bedeutung der Radiuskoordinate λ unter den kollektiven Koordinaten $\{\xi_i\}$	21
1.3 Das Instanton-Hard-Core-Gas	22
1.4 Die Verteilung der Instantonradien	25
1.4.1 Die Verteilung im kanonischen Ensemble	25
1.4.2 Die Verteilung im großkanonischen Ensemble	26
2 Das eindimensionale Instanton-Gas	28
2.1 Die Verteilung der Instantonradien	28
2.2 Der thermodynamische Limes	31
3 Monte-Carlo-Simulationen	39
3.1 Der METROPOLIS-Algorithmus	39
3.2 Der METROPOLIS-Algorithmus im klassischen großkanonischen Ensemble	41
3.2.1 Vorschlagswahrscheinlichkeiten	42
3.2.2 Annahmewahrscheinlichkeiten	44

3.3	Umsetzung des Algorithmus	46
3.4	Erste Ergebnisse der Simulationen	47
3.4.1	Der eindimensionale Fall	47
3.4.2	Der mehrdimensionale Fall	48
4	Das allgemeine Instanton-Gas	51
4.1	Integrationen im kanonischen Ensemble	52
4.1.1	Die Integration über die Instantonpositionen	54
4.1.2	Die Integration über die Instantonradien	56
4.1.3	Integration über das Gesamtvolumen v	57
4.2	Aufsummation der K-Instantonbeiträge	58
4.2.1	Numerische Summation	58
4.2.2	Analytische Näherung und thermodynamischer Limes	62
4.3	Theorie und Simulationen für $\nu = 4$	68
Zusammenfassung und Ausblick		76
A	Berechnung der Integrale	79
A.1	Integral über die Instantonpositionen	79
A.2	Integral über die Instantonradien	80
Abbildungsverzeichnis		83
Tabellenverzeichnis		86
Literaturverzeichnis		87
Schlußwort		91

Einleitung

In den letzten Jahrzehnten sind große Fortschritte bei der perturbativen Behandlung von Feldtheorien und insbesondere Eichtheorien wie der QCD gemacht worden. Jedoch führt dieses Vorgehen nicht immer zu zufriedenstellenden Ergebnissen, da einige Phänomene nicht störungstheoretisch erfaßt werden können.

In den siebziger Jahren brachte die Entdeckung spezieller Lösungen der Euklidischen Feldgleichungen neue Impulse zur Beschreibung nicht-perturbativer Effekte in quantisierten Eichtheorien. Da diese Lösungen endliche Wirkung besitzen, also in Raum und Zeit lokalisiert sind, werden sie auch als *Instantonen* bezeichnet. Darüber hinaus verfügen sie über eine topologische Ladung oder auch Windungszahl, die ihre Stabilität gewährleistet.

Wenig später wurde klar, daß Instantonen die entarteten Vakua der klassischen Theorie verbinden und so in der quantisierten Theorie Tunnelvorgänge beschreiben. Dies führte zum Konzept des θ -Vakuums. Während noch einige unbefriedigend gelöste bzw. offene Probleme in diesem Zusammenhang existieren, wie z.B. die starke CP-Verletzung, erschließen sich auch vielversprechende Ansätze. So kann das $U(1)$ -Problem, das Fehlen eines erwarteten Goldstone-Bosons in der QCD, in diesem Zusammenhang verstanden werden. Da Instantoneffekte auch das Quarkpotential beeinflussen, bestand große Hoffnung, durch diesen Mechanismus eine Erklärung für Confinement-Effekte im Rahmen der QCD geben zu können. Während dies in verschiedenen Theorien möglich ist, stellt sich die Situation hier jedoch offenbar schwieriger dar [1], [2], [3].

Da die Instantonphysik trotz mancher Probleme interessante Perspektiven eröffnet, gibt es zahlreiche Bemühungen auf diesem Gebiet. Die Eigenschaft lokalisierter Wirkung verleiht den Instantonen teilchenartige Charakteristika. Daraus ergibt sich der phänomenologische Ansatz eines Instantongases als Ausgangspunkt für weitere Untersuchungen. Die Wechselwirkung zwischen diesen sogenannten Quasiteilchen in vier Raum-Zeit-Dimensionen wird durch dipolartige Terme dominiert [1].

Eichtheorien gestatten das Auftreten von Instantonen beliebiger Ausdehnung. Setzt die Wechselwirkung dem keinen Widerstand entgegen, so führt dies zu Divergenzen in den Übergangsmatrixelementen der Theorie. Dabei ist die Einführung einer willkürlichen Beschränkung in der Größe der Instantonen unbefriedigend und insbesondere nicht konsistent mit den Vorgaben der Renormierungsgruppe. Entsprechend

wird der repulsive Charakter der Instantonwechselwirkung bei kleinen Abständen untersucht bzw. postuliert, um einen dynamischen Cutoff einzuführen. Durch die Abstoßung bei kleinen Distanzen werden große Instantonen unterdrückt, was zu einer selbstkonsistenten Beschränkung der Instantonausdehnung führt.

Es ist interessant, dieses qualitative Ergebnis an einem einfachen Modell genauer zu studieren. Hier bietet sich als einfachste Näherung an, den Instantonen einen harten Kern zu verleihen. In der vorliegenden Arbeit werden die oben besprochenen Eigenschaften an einem solchen Hard-Core-Gas quantitativ untersucht und erfaßt.

Kapitel 1

Instantonen

Um die Instantonen als zu behandelnde Objekte zu verstehen, wird ein Überblick über dieses Gebiet und die damit verbundenen Phänomene gegeben. Wesentliche Eigenschaften dieser sogenannten „Quasiteilchen“ treten schon in Systemen der Quantenmechanik hervor, jedoch werden sie dort nicht von modellspezifischen Komplikationen verdeckt, so daß ein Abriß dieses Gebietes sinnvoll ist. Dabei wird deutlich, daß es sich bei Instantonen nicht um (Quasi-)Teilchen im üblichen Sinne handelt, sondern um Entwicklungspunkte des Pfadintegrals mit gewissen teilchenartigen Charakteristika.

In einem nächsten Schritt wird es um Instantonen in Eichtheorien gehen. Während sie im YANG-MILLS-System in den siebziger Jahren von POLYAKOV *et al.* [4] erstmalig entdeckt und untersucht wurden, erkannte man bald darauf ihre Bedeutung im Zusammenhang mit Tunnelprozessen zwischen den klassischen Vakua der Theorie [5]. In der quantisierten Theorie treten jedoch Divergenzen in den Übergangssamplituden hervor, die aus einer Invarianz der Feldgleichungen resultieren. Ziel dieser Arbeit ist es, diese Phänomene besser zu verstehen und an einem vereinfachten Modell das Verhalten nach Vorgabe eines dynamischen Cutoff zu studieren.

Neben der folgenden Einführung in dieses Gebiet bietet sich die Lektüre von [1], [2], [3] und [6] an; ein theoretischerer Zugang wird in [7] verfolgt. Ein kurzer aktueller Überblick wird in [8] vermittelt.

1.1 Instantonen in der Quantenmechanik

1.1.1 Das Pfadintegral

In Rahmen der Quantenmechanik besteht Interesse an Übergangsmatrixelementen der Form

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \langle q' | \hat{U}(iT) | q \rangle, \quad (1.1)$$

wobei $|q_i, t_i\rangle$ und $|q_f, t_f\rangle$ den jeweiligen Anfangs- bzw. Endzustand des Systems beschreiben [9]. $|q\rangle$ und $|q'\rangle$ sind Eigenzustände des Ortsoperators \hat{q} und der Zeitentwicklungsoperator \hat{U} ist gegeben durch

$$\hat{U}(iT) = \exp\left(-\frac{iT}{\hbar}\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})\right), \quad (1.2)$$

wobei wie auch im folgenden ohne Einschränkung angenommen werden kann, daß

$$\begin{aligned} t_i &= -\frac{T}{2} & t_f &= +\frac{T}{2} \\ q_i\left(-\frac{T}{2}\right) &= q & q_f\left(+\frac{T}{2}\right) &= q'. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Die obige Übergangsamplitude lässt sich durch das von FENYMAN eingeführte Pfadintegral darstellen

$$\langle q'|\hat{U}(iT)|q\rangle = \int_q^{q'} [d^D q] \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[q]\right) \quad (1.4)$$

$$[d^D q] = \text{const.} \prod_{t_i < t < t_f} d^D q(t). \quad (1.5)$$

Dabei ist $S[q]$ das klassische Wirkungsfunktional

$$S[q] = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt L(q(t), \dot{q}(t)) \quad (1.6)$$

mit der Lagrange-Funktion

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{q}_j^2 - V(q). \quad (1.7)$$

Es werden also anders als im klassischen Fall nicht nur die Lösungen der Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right] = 0 \quad (1.8)$$

als stationäre Punkte von S betrachtet, sondern alle stetigen Wege zwischen q und q' mit entsprechender Gewichtung. Nun wird eine analytische Fortsetzung der obigen Ausdrücke gewonnen, indem beliebige komplexe Zeiten $e^{i\theta}t$ zugelassen werden:

$$\langle q' | U(i e^{i\theta} T) | q \rangle = \int_q^{q'} [d^D q] \exp\left(\frac{i}{\hbar}S_\theta[q]\right) \quad (1.9)$$

$$S_\theta[q] = e^{-i\theta} \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} dt \left(\frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{q}_j^2 - e^{2i(\theta)} V(q) \right). \quad (1.10)$$

Von Bedeutung sind die folgenden Spezialfälle der Formel (1.9):

- $\theta = 0$ Feynmann- /Minkowski-Pfadintegral
Die oben angeführten Formeln werden reproduziert.
- $\theta = \frac{\pi}{2}$ Euklidisches Pfadintegral

$$\langle q' | U(T_E) | q \rangle = \int_q^{q'} [d^D q] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E[q] \right) \quad (1.11)$$

$$S_E[q] = \int_{-\frac{T_E}{2}}^{+\frac{T_E}{2}} dt_E \left(\frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{q}_j^2 + V(q) \right) \quad (1.12)$$

Im Euklidischen Fall ist also T_E reell, was bei Vergleich mit (1.4) gerade rein imaginären Zeiten entspricht.

Auf der einen Seite findet die sogenannte *Wick-Rotation* Anwendung, um das Pfadintegral mathematisch und numerisch besser behandeln zu können, andererseits besteht eine enge Verknüpfung des Euklidischen Pfadintegrals mit Tunnelprozessen.

1.1.2 Instantonen und Tunnelprozesse

Vor einer weiteren Behandlung des Themas erscheint es sinnvoll, eine erste „Arbeitsdefinition“ des Begriffes Instanton anzugeben:

Instantonen sind nicht-singuläre Lösungen der Euklidischen Bewegungsgleichungen mit einer lokalisierten Lagrange-Funktion, d.h. sie besitzen eine endliche Euklidische Wirkung.

Ein-Instantonlösungen

Untersucht werden sollen die Instantonlösungen in einem eindimensionalen System ($q = x$, $m = 1$) mit dem Potential

$$V(x) = \frac{\lambda}{2}(x^2 - a^2)^2 \quad (1.13)$$

und mit der Euklidischen Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2 x}{d\tau^2} = \frac{dV}{dx}. \quad (1.14)$$

Offenbar beschreibt (1.14) ein Teilchen mit Einheitsmasse in einem System mit dem Potential $-V$, wobei die Energie

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \quad (1.15)$$

eine konstante Größe darstellt. Da nun Lösungen der Gleichung (1.14) von Interesse sind, die die beiden Mulden des Potentials V bei $\pm a$ verbinden, entspricht dieses im Bild eines Teilchens im Potential $-V$ Konfigurationen mit der Randbedingung $E = 0$. So kann (1.14) mit den obigen Randbedingungen auf die Differentialgleichung

$$\frac{dx}{d\tau} = \pm \sqrt{2V(x)} \quad (1.16)$$

mit den Forderungen

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} x = \mp a \quad \lim_{\tau \rightarrow \infty} x = \pm a \quad (1.17)$$

zurückgeführt werden. Bei dem vorgegebenen Doppelmuldenpotential wird (1.16) von der Funktionenklasse

$$x(\tau) = \pm a \tanh(\mu(\tau - \tau_0)) \quad \mu = a\sqrt{\lambda} \quad (1.18)$$

gelöst. Dabei ist die Lagrange-Funktion

$$L(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x) = 2V(x) \quad (1.19)$$

lokalisiert um τ_0 , und es ergibt sich entsprechend für die Euklidische Wirkung

$$S_E[x] = \frac{4\mu^3}{3\lambda} < \infty \quad (1.20)$$

in Übereinstimmung mit der obigen Arbeitsdefinition, so daß es sich hier um Instantonlösungen handelt.

Schließlich soll das Konzept der topologischen Ladung nicht unerwähnt bleiben, das in diesem Zusammenhang zwar nicht von zentraler Bedeutung zu sein scheint, jedoch in verallgemeinerter Form eine wichtige Rolle spielen wird. Zunächst kann beobachtet werden, daß die obigen Lösungen von (1.16) zusammen mit den trivialen Lösungen $x = \pm a$ in vier (Homotopie-) Klassen zerfallen, indiziert durch ihre Werte für $\tau \rightarrow \pm\infty$:

$$\begin{aligned} (-a, a) \quad & x(\tau) = a \tanh(\mu\tau) \\ (a, -a) \quad & x(\tau) = -a \tanh(\mu\tau) \\ (a, a) \quad & x = +a \\ (-a, -a) \quad & x = -a. \end{aligned}$$

In den durch diese Repräsentanten gegebenen Klassen befinden sich jeweils noch die um τ_0 verschobenen Instantonen. Die *topologische Ladung* oder auch *Windungszahl* Q ist definiert durch

$$Q = \frac{1}{2a}(x(\tau = \infty) - x(\tau = -\infty)) = \int d\tau \frac{1}{2a} \frac{\partial x}{\partial \tau} \in \mathbb{Z}, \quad (1.21)$$

wobei Lösungen mit $Q = 1(-1)$ als Instantonen (Antiinstantonen) bezeichnet werden.

1.1.3 Multi-Instantonlösungen und Tunnelprozesse

Im Rahmen einer quantisierten Theorie besteht Interesse an dem Übergang

$$\langle a | e^{-\frac{\hat{H}T_E}{\hbar}} | -a \rangle = N \int_{-a=x(-\frac{T_E}{2})}^{a=x(\frac{T_E}{2})} [dx] e^{-\frac{S_E}{\hbar}}, \quad (1.22)$$

der gerade den Tunnelprozeß zwischen den beiden Potentialmulden beschreibt. Üblicherweise wird eine Entwicklung der Wirkung um ihre stationären Punkte, in diesem Fall die Instantonlösungen, vorgenommen. In nullter Ordnung ergibt dies gerade die bekannte WKB-Formel

$$\begin{aligned} \langle a | e^{-\frac{\hat{H}T_E}{\hbar}} | -a \rangle &\sim e^{-\frac{S_{E_0}}{\hbar}} \\ S_{E_0}(E=0) &= \int d\tau \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \\ &= \int_{-a}^a dx \sqrt{2V}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Um Korrekturen höherer Ordnung zu berücksichtigen, wird bis zur Gaußschen Näherung im Rahmen der Sattelpunktsentwicklung fortgeschritten. Von nun an soll der Index E aus Gründen der Übersichtlichkeit unterdrückt werden, jedoch wird weiterhin Euklidisch gerechnet. Insbesondere ist T eher eine Hilfsgröße, denn es wird noch der Grenzfall $T \rightarrow \infty$ zu untersuchen sein. Dort wird auch festzustellen sein, daß Multi-Instantonlösungen als Superposition der bekannten Instantonlösungen ebenfalls beachtet werden müssen [2], [3], [10].

Sei \bar{x} nun eine Lösung der Bewegungsgleichungen, d.h. ein stationärer Punkt der Wirkung S und $x(\tau) = \bar{x}(\tau) + y(\tau)$, dann ist

$$S[\bar{x} + y] = S[\bar{x}] + \frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau' y(\tau) \left(\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\tau) \delta x(\tau')} \right)_{\bar{x}} y(\tau') + \mathcal{O}(y^3). \quad (1.24)$$

Die zweiten funktionalen Ableitungen ergeben

$$\left(\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\tau) \delta x(\tau')} \right)_{x=\bar{x}} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 V(x(\tau))}{\partial x^2} \right)_{x=\bar{x}} \delta(\tau - \tau'), \quad (1.25)$$

so daß es sinnvoll ist, die Abweichungen von $\bar{x}(\tau)$ durch ein VONS von Eigenfunktionen $\{x_n\}$ des Operators

$$\hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 V(x(\tau))}{\partial x^2} \right)_{x=\bar{x}} = -\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 V(\bar{x}(\tau))}{\partial x^2} \quad (1.26)$$

auszudrücken in der Form

$$x(\tau) = \bar{x}(\tau) + \sum_n c_n x_n(\tau). \quad (1.27)$$

Damit stellt sich die Wirkung mit $y(\tau) = x_n(\tau)$ dar als

$$S[\bar{x} + x_n] = S[\bar{x}] + \frac{1}{2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau x_n(\tau) \hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}} x_n(\tau) + \mathcal{O}(x_n^3) \quad (1.28)$$

und mit der Ersetzung des Maßes durch

$$[dx] = N \prod_n (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} dc_n \quad (1.29)$$

wird die Sattelpunktsentwicklung durchgeführt ($\{\lambda_n\}$ seien die Eigenwerte zu den $\{x_n\}$):

$$\begin{aligned} \langle a | e^{-\frac{\hat{H}T}{\hbar}} | -a \rangle &\approx Ne^{-\frac{S[\bar{x}]}{\hbar}} \int \prod_n \frac{dc_n}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2\hbar}\lambda_n c_n^2} (1 + \mathcal{O}(\hbar)) \\ &= Ne^{-\frac{S[\bar{x}]}{\hbar}} \left(\det \hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}} \right)^{-\frac{1}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)) \\ &= Ne^{-\frac{S[\bar{x}]}{\hbar}} \prod_n \left(\frac{1}{\lambda_n} \right)^{\frac{1}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)). \end{aligned} \quad (1.30)$$

Im Zusammenhang mit Tunnelprozessen zwischen den Potentialmulden sind Lösungen mit den Randbedingungen

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} \bar{x}_{\pm} = -a \quad \lim_{\tau \rightarrow \infty} \bar{x}_{\pm} = a$$

gefragt. Aus dem vorangehenden Abschnitt ist bekannt, daß diese Instantonlösungen \bar{x}_{\pm} für $T \rightarrow \infty$ jedoch in weiten Bereichen aussehen wie die trivialen Lösungen $\bar{x} = \pm a$, so daß es sinnvoll ist, zunächst über letztere etwas zu lernen. Hier stellt sich der Operator $\hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}}$ dar als

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}}_{\pm a} &= -\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}|_{\pm a} \\ &= -\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(\pm a) \\ &= -\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2, \end{aligned} \quad (1.31)$$

so daß die Eigenfunktionen durch

$$x_n^{\pm a} = \sin \left(\frac{n\pi\tau}{T} \right) \quad (1.32)$$

gegeben sind. Weitere Rechnungen liefern

$$\begin{aligned}
 N(\det \hat{\mathcal{O}}_{\pm a})^{-\frac{1}{2}} &= N \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n^2 \pi^2}{T^2} + \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \\
 &= NF(T) \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
 &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\omega}{\sinh \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \\
 &\xrightarrow{T \rightarrow \infty} \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega T}{2}}, \tag{1.33}
 \end{aligned}$$

wobei das Integrationsmaß so gewählt wird, daß $NF(T) = (2\pi\hbar T)^{-\frac{1}{2}}$, um eine in sich konsistente Theorie zu definieren [3]. Schließlich besitzt $\hat{\mathcal{O}}_{\pm a}$ keine Nullmoden. Zurückkehrend zum eigentlichen Problem, der Untersuchung der (Anti-) Instantonen als asymptotisch stationäre Punkte der Wirkung sowie die Entwicklung des Wirkungsfunktionalen an diesen Punkten, sind verschiedene Dinge zu beachten:

1. Für $T \rightarrow \infty$ wird S translationsinvariant, so daß neben $\bar{x}_{\pm}(\tau)$ auch $\bar{x}_{\pm}(\tau - \tau_0)$ für beliebige τ_0 stationärer Punkt von S ist. Dies führt zu einer Divergenz im Gauß-Integral oder äquivalent zu einer Nullmode in der sogenannten Fluktuationsdeterminante. Dies soll zunächst durch einen Faktor P berücksichtigt werden, wobei \det' die Determinante unter „Ausnahme“ der Nullmode bezeichnen soll:

$$\langle a | e^{-\frac{\hbar T}{\hbar}} | -a \rangle \approx NP e^{-\frac{S[\bar{x}_{\pm}]}{\hbar}} \left(\det' \hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}_{\pm}} \right)^{-\frac{1}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)). \tag{1.34}$$

Schließlich kann die normierte Eigenfunktion zum Eigenwert 0 auch direkt angegeben werden:

$$x_0^{\bar{x}_{\pm}}(\tau) = x_0(\tau) = \frac{1}{\sqrt{S[\bar{x}_{\pm}]}} \frac{d\bar{x}_{\pm}(\tau - \tau_0)}{d\tau}. \tag{1.35}$$

Bei der Integration über den Entwicklungskoeffizienten c_1 (O.E. $\lambda_1 = 0$) in (1.30) ergibt sich daraus offenbar eine Divergenz. Nun ist eine Variation in c_1 um \bar{x}_{\pm} gegeben durch

$$dx = x_0(\tau) dc_1 = \frac{1}{\sqrt{S[\bar{x}_{\pm}]}} \frac{d\bar{x}_{\pm}(\tau - \tau_0)}{d\tau} dc_1, \tag{1.36}$$

und andererseits ergibt sich entsprechend für τ

$$\begin{aligned} dx &= \frac{\partial \bar{x}_\pm(\tau - \tau_0)}{\partial \tau} d\tau = \frac{d\bar{x}_\pm(\tau - \tau_0)}{d\tau} d\tau \\ \implies \frac{1}{\sqrt{S[\bar{x}_\pm]}} dc_1 &= d\tau \end{aligned} \quad (1.37)$$

$$\implies P = \left(\frac{\sqrt{S[\bar{x}_\pm]}}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} T. \quad (1.38)$$

Die Integration über c_1 wird also durch die Integration über die Zeitachse, d.h. die Zentren der Instantonen und Antiinstantonen ersetzt. Hierbei ist $J = \sqrt{S[\bar{x}_\pm]}$ die Jacobi-Determinante, die sich aus der Variablentransformation ergibt. Dies führt zu der Übergangsamplitude

$$\langle a | e^{-\frac{\hat{H}T}{\hbar}} | -a \rangle \approx N \left(\frac{\sqrt{S[\bar{x}_\pm]}}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} T e^{-\frac{S[\bar{x}_\pm]}{\hbar}} \left(\det' \hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}_\pm} \right)^{-\frac{1}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)). \quad (1.39)$$

Allgemein führen auch in anderen Theorien Invarianzen der Bewegungsgleichungen zu Nullmoden in der Fluktuationsdeterminante, die analog durch Integrationen über sogenannte *kollektive Koordinaten* ersetzt werden.

Zur besseren Übersicht wird $S[\bar{x}_\pm]$ im folgenden einfach als S_0 bezeichnet.

2. Da $\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} \bar{x}_\pm = \pm a$, ist für hinreichend große τ $\hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}_\pm(\tau)} \approx \hat{\mathcal{O}}_{\pm a}$. So unterscheidet sich der Operator $\hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}_\pm(\tau)}$ in weiten Bereichen kaum von dem Operator $\hat{\mathcal{O}}_{\pm a}$, der das Vakuum beschreibt. Die Abweichungen in einem Bereich um das Zentrum τ_0 des Instantons bzw. Antiinstantons sollen durch einen Faktor \mathcal{K} berücksichtigt werden, der später noch genauer bestimmt wird:

$$\begin{aligned} \langle a | e^{-\frac{\hat{H}T}{\hbar}} | -a \rangle &\approx N e^{-\frac{S_0}{\hbar}} \left(\det \hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}_\pm(\tau)} \right)^{-\frac{1}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)) \\ &= N \mathcal{K} e^{-\frac{S_0}{\hbar}} \left(\det \hat{\mathcal{O}}_{\pm a} \right)^{-\frac{1}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)) \\ &\stackrel{T \rightarrow \infty}{=} e^{-\frac{S_0}{\hbar}} \mathcal{K} \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega T}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)). \end{aligned} \quad (1.40)$$

3. Da für große τ gilt

$$\frac{dx}{dt} = \omega(a - x) \quad (1.41)$$

$$(a - x) \sim e^{-\omega\tau} \quad (1.42)$$

$$\omega = \sqrt{V''(\pm a)}, \quad (1.43)$$

lösen auch Konfigurationen \bar{x}_K aus K weit entfernten Instantonen und Antiinstantonen, wie in Abbildung 1.1 dargestellt, näherungsweise die Bewegungsgleichungen, d.h. sind stationäre Punkte von S mit Wirkung KS_0 .

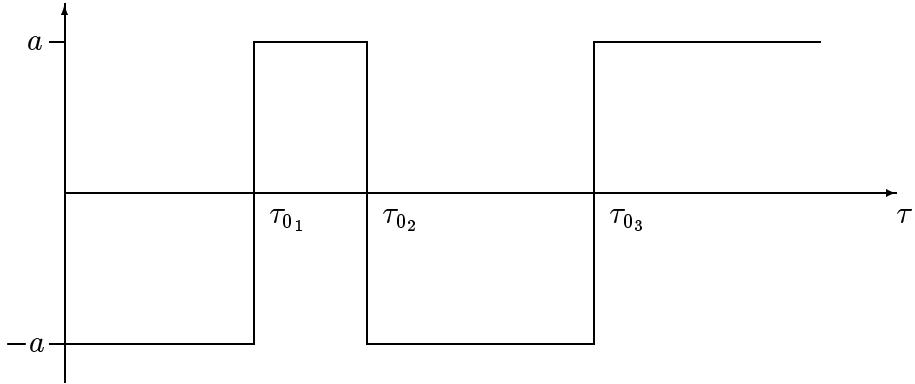


Abbildung 1.1: Konfiguration aus drei (Anti-) Instantonen \bar{x}_3

Hierbei ist zu beachten, daß die Instantonen und Antiinstantonen sich auf der Zeitachse abwechseln müssen. Da als weitere Randbedingung

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} \bar{x}_K = -a \quad \lim_{\tau \rightarrow \infty} \bar{x}_K = a \quad (1.44)$$

vorgegeben ist, muß die Instantanzahl K ungerade sein. Schließlich liefert jedes Instanton bzw. Antiinstanton in (1.40) einen Faktor \mathcal{K} in der Übergangsamplitude. Die Summation über die Positionen der Instantonen und Antiinstantonen liefert [2], [10]

$$\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_1 \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_{K-1}} d\tau_K = \frac{T^K}{K!}. \quad (1.45)$$

Es folgt bis auf Korrekturen $\mathcal{O}(\hbar)$

$$\begin{aligned} & \langle +a | e^{-\frac{\hat{H}T}{\hbar}} | -a \rangle \\ & \approx N \left(\det \hat{\mathcal{O}}_{\pm a} \right)^{-\frac{1}{2}} \sum_{K \text{ ungerade}} \frac{(T\mathcal{K}e^{-\frac{S_0}{\hbar}})^K}{K!} \\ & = N \left(\det \hat{\mathcal{O}}_{\pm a} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \left(\exp(T\mathcal{K}e^{-\frac{S_0}{\hbar}}) - \exp(-T\mathcal{K}e^{-\frac{S_0}{\hbar}}) \right) \\ & \stackrel{T \rightarrow \infty}{=} \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \frac{1}{2} \left(\exp(T\mathcal{K}e^{-\frac{S_0}{\hbar}}) - \exp(-T\mathcal{K}e^{-\frac{S_0}{\hbar}}) \right). \end{aligned} \quad (1.46)$$

4. Die Näherungen basieren auf der Annahme, daß die Instantonen bzw. Antiinstantonen weit voneinander getrennt sind. Um zu prüfen, ob die bisherigen Rechnungen unter diesem Gesichtspunkt konsistent sind, wird die folgende Überlegung angestellt. Für beliebiges aber festes x wächst die Exponentialreihe $\sum \frac{x^K}{K!}$ mit K bis K die Größenordnung von x erreicht, danach fallen ihre

Werte mit K schnell ab. Die wesentlichen Beiträge in (1.46) liegen also in dem Bereich, für den gilt: $K < \mathcal{K}Te^{-\frac{S_0}{\hbar}}$, d.h. für die Instanton-Antiinstanton-Dichte gilt dort

$$\frac{K}{T} < \mathcal{K}e^{-\frac{S_0}{\hbar}}. \quad (1.47)$$

Ist \hbar also klein gegen S_0 , d.h. in der semiklassischen Näherung, so sind diese Anforderungen gut erfüllt. Hier spricht man auch von der Näherung des verdünnten Gases.

5. Ein Vergleich von Gleichung (1.39), in der die Nullmode in $\det \hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}\pm}$ durch eine Integration über τ , d.h. einen Faktor T , berücksichtigt wird, mit dem Ein-Instantonbeitrag in (1.46) liefert

$$\mathcal{K} = \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\det \hat{\mathcal{O}}_{\pm a}}{\det' \hat{\mathcal{O}}_{\bar{x}\pm}} \right)^{\frac{1}{2}} (1 + \mathcal{O}(\hbar)). \quad (1.48)$$

Insgesamt wurde ausgerechnet, wie die klassischen Instantonlösungen in die Übergangsamplitude $\langle a | e^{-\frac{\hat{H}T}{\hbar}} | -a \rangle$ bei Entwicklung bis $\mathcal{O}(\hbar)$ eingehen. Die dabei auftretenden Rechnungen bzw. Strukturen sind auch in komplexeren Theorien anzutreffen, so daß hier noch einmal die wesentlichen Komponenten des K -Instantonbeitrages aufgeschlüsselt werden:

$$\begin{aligned} & N \left(\det \hat{\mathcal{O}}_{\pm a} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{(T\mathcal{K}e^{-\frac{S_0}{\hbar}})^K}{K!} \\ & \sim \frac{1}{K!} \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^K} e^{-\frac{KS_0}{\hbar}} \int d\tau_1 \dots \int d\tau_K J(\tau_i) \left(\frac{\det' \Delta_K}{\det \Delta_0} \right)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

In diesem Zusammenhang werden die K -Instanton- und Vakuumfluktuationsdeterminanten, die oben als Produkte dargestellt werden, durch $\det' \Delta_K$ und $\det \Delta_0$ zusammengefaßt. Darüber hinaus wird die Rolle der Zeitkoordinaten als kollektive Koordinaten, entspringend aus der Zeittranslationsinvarianz, deutlich. Die Substitution zu den kollektiven Koordinaten liefert schließlich die Jacobi-Determinate $J(\tau_i)$. Vor dem Integral drückt der kombinatorische Faktor $\frac{1}{K!}$ die Ununterscheidbarkeit der Instantonen aus, während der Exponentialfaktor die Näherung nullter Ordnung beinhaltet.

1.2 Instantonen in Eichtheorien

Auch in Eichtheorien existieren Instantonlösungen, die nun exemplarisch für $SU(2)$ -YANG-MILLS-Theorien vorgestellt werden [1], [3], [4], [5], [6], [7], [11], [12], [13]. Die

Eichgruppe ist die $SU(2)$, deren Generatoren $\{\sigma_a\}$ mit der Normierung

$$Tr(\sigma_a \sigma_b) = 2\delta_{ab} \quad (1.49)$$

die folgenden Kommutatorrelationen erfüllen

$$\left[\frac{\sigma_a}{2}, \frac{\sigma_b}{2} \right] = i\epsilon_{abc} \frac{\sigma_c}{2}. \quad (1.50)$$

Damit haben Eichtransformationen die Gestalt

$$U(\theta(x)) = \exp \left(\frac{i\sigma^a \theta^a(x)}{2} \right), \quad (1.51)$$

wobei $\{\sigma_a\}$ die Pauli-Matrizen sind. Die zentralen Größen dieser Theorie sowie deren Verhalten unter Eichtransformationen seien hier kurz zusammengestellt:

- Eichfelder

$$A_\mu = \frac{g_0}{i} \frac{\sigma^a}{2} A_\mu^a \quad (1.52)$$

$$A_\mu \longrightarrow U A_\mu U^{-1} + U(\partial_\mu U^{-1}) \quad (1.53)$$

- Feldstärketensor

$$F_{\mu\nu} = \frac{g_0}{i} \frac{\sigma^a}{2} F_{\mu\nu}^a \quad (1.54)$$

$$= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + [A_\mu, A_\nu] \quad (1.55)$$

$$F_{\mu\nu} \longrightarrow U F_{\mu\nu} U^{-1} \quad (1.56)$$

- Wirkung

$$S_E = -\frac{1}{2g_0^2} \int d^4x Tr(F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}) \quad (1.57)$$

- Feldgleichung (ohne Quellen)

$$D_\mu F_{\mu\nu} = \partial_\mu F_{\mu\nu} + [A_\mu, F_{\mu\nu}] = 0 \quad (1.58)$$

- Dauler Tensor und Bianchi-Identität

$$\tilde{F}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\lambda\rho} F_{\lambda\rho} \quad (1.59)$$

$$\tilde{\tilde{F}}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu} \quad (1.60)$$

$$D_\mu \tilde{F}_{\mu\nu} = 0. \quad (1.61)$$

An dieser Stelle sei die erweiterte Definition eines Instantons im Rahmen einer Feldtheorie gegeben.

Instantonen sind nicht-singuläre Lösungen der Euklidischen Feldgleichungen mit einer lokalisierten Lagrange-Dichte, d.h. sie sind in Raum und Zeit lokalisierte Objekte und besitzen damit eine endliche Euklidische Wirkung.

Daraus ergibt sich die Aufgabe, für die Bewegungsgleichung (1.58) Lösungen endlicher Wirkung zu finden. Die letztere Bedingung stellt folgende Anforderungen an den Feldstärketensor und damit an die Eichfelder:

$$F_{\mu\nu} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (1.62)$$

$$A_\mu \xrightarrow{r \rightarrow \infty} U(\partial_\mu U^{-1}) = -(\partial_\mu U)U^{-1}. \quad (1.63)$$

Hierbei ist U eine Eichtransformation, die auf der \mathbb{S}_∞^3 -Sphäre definiert ist (r sei der Betrag eines Vektors im Euklidischen Raum E^4), d.h. sie muß nicht notwendigerweise analytisch auf E^4 fortsetzbar sein. In jedem Fall wird A_μ jedoch auf \mathbb{S}_∞^3 zu einer reinen Eichung. Im folgenden werde \mathbb{S}_∞^3 im E^4 als \mathbb{S}_{phys}^3 bezeichnet. Betrachtet werden hier also Abbildungen von \mathbb{S}_{phys}^3 in die Menge der Nullstellen des Feldstärketensors bezüglich A_μ . Letztere sind aber gerade durch die Elemente der Form $U(\partial_\mu U^{-1})$ aus der Eichgruppe $SU(2)$ gegeben, d.h. durch den Gruppenraum der Eichgruppe. Da dort jedes Element die Darstellung

$$U = u_0 + i \sum_{j=1}^3 u_j \sigma_j \quad \sum_{j=0}^3 u_j^2 = 1 \quad (1.64)$$

hat, ist der Gruppenraum eine \mathbb{S}^3 -Sphäre, parametrisiert durch den Einheitsvektor u . Sie soll künftig mit \mathbb{S}_{int}^3 bezeichnet werden.

1.2.1 Homotopie und Windungszahl

Grundbegriffe

Instantonlösungen in Eichtheorien können wie im eindimensionalen Fall in Funktionenklassen eingeteilt werden. Die Elemente einer solchen (Homotopie-) Klasse zeichnet dabei aus, daß sie durch stetige Deformationen auseinander hervorgehen. Dies wird im folgenden genauer festgelegt.

Definition:

X, Y seien topologische Räume
 $f_0, f_1: X \rightarrow Y$ stetige Funktionen
 f_0 und f_1 heißen *homotop*,

$$\Leftrightarrow \exists F : X \times [0, 1] \rightarrow Y \text{ stetig} \\ F(x, 0) = f_0(x) \\ F(x, 1) = f_1(x) \\ \forall x \in X.$$

Dies definiert eine Äquivalenzrelation, die Äquivalenzklassen heißen
Homotopieklassen.

Beispiel:

Für $X = Y = \mathbb{S}^1$ sind die folgenden Abbildungen Repräsentanten der Homotopieklassen der Abbildungen von \mathbb{S}^1 nach \mathbb{S}^1 :

$$\begin{aligned} [0, 2\pi[&\longrightarrow \{e^{i\vartheta}\}_{\vartheta \in \mathbb{R}} \\ \theta &\longrightarrow e^{iQ\theta} = (e^{i\theta})^Q \end{aligned}$$

Die Homotopieklassen werden durch eine *Windungszahl* $Q \in \mathbb{Z}$ indiziert.

Satz:

Alle Abbildungen von \mathbb{S}^D nach \mathbb{S}^D ($D \in \mathbb{N}$) zerfallen in Homotopieklassen, die durch eine Windungszahl $Q \in \mathbb{Z}$ charakterisiert werden können [3].

Der Pontryagin-Index

Wie oben festgestellt wurde, liefert die Randbedingung endlicher Euklidischer Wirkung bei Instantonlösungen der Feldgleichungen Abbildungen

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{phys}^3 &\longrightarrow \mathbb{S}_{int}^3 \\ (\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) &\longrightarrow U(\partial_\mu U^{-1})(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3), \end{aligned}$$

die in Homotopieklassen mit Windungszahl oder auch *Pontryagin-Index* Q zerfallen ($\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3$ sind ohne Einschränkung Polarwinkel in E^4). Hier kann nur eine kurze Einführung der Begriffe geboten werden, ausführlichere Behandlung erfährt dieses Thema z.B. in [2], [3] und [7]. Der Pontryagin-Index von $A_\mu = U(\partial_\mu U^{-1}) = -(\partial_\mu U)U^{-1}$ ist durch das Oberflächenintegral

$$Q = \frac{1}{24\pi^2} \oint_{\mathbb{S}_{phys}^3} d\sigma_\mu \epsilon_{\mu\nu\lambda\tau} Tr(U(\partial_\nu U^{-1})U(\partial_\lambda U^{-1})U(\partial_\tau U^{-1})) \quad (1.65)$$

$$= \frac{1}{24\pi^2} \oint_{\mathbb{S}_{phys}^3} d\sigma_\mu \epsilon_{\mu\nu\lambda\tau} Tr(A_\nu A_\lambda A_\tau) \quad (1.66)$$

$$= \frac{1}{24\pi^2} \int_{G=\mathbb{S}_{int}^3} d^3 g \quad (1.67)$$

gegeben. Hierbei stellt d^3g ein invariantes Volumenelement im Gruppenraum G der $SU(2)$ dar, so daß das Bild einer Windungszahl erhalten bleibt.

Dies wird an einem Beispiel klar:

$$U^{(1)}(x) = \frac{x_0 + ix_j\sigma_j}{|x|}. \quad (1.68)$$

Der Anschauung entsprechend sollte $U^{(1)}$ die Windungszahl 1 tragen, was wie folgt nachgerechnet wird:

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{24\pi^2} \oint d\sigma_\mu \frac{12x_\mu}{|x|^4} \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \oint d\Omega x_\mu |x|^2 \frac{x_\mu}{|x|^4} \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \oint d\Omega \\ &= 1. \end{aligned}$$

Dort wird berücksichtigt, daß das Volumen der \mathbb{S}^3 -Einheitssphäre $2\pi^2$ ist.

Es läßt sich darüber hinaus zeigen, daß Q eine Invariante der Homotopiekasse ist und daß jede Lösung der Windungszahl Q homotop ist zu $U^{(Q)} = (U^{(1)})^Q$.

Schließlich ist der 3-dimensionale Raum E^3 , in dem alle Punkte bei Unendlich mit einem Punkt identifiziert werden, topologisch äquivalent zur \mathbb{S}^3 -Sphäre. So unterliegen die Abbildungen dieses Raumes in den Gruppenraum der $SU(2)$ einer analogen Klassifikation. Als Beispiele für Abbildungen mit Windungszahl 1 seien hier

$$U(\vec{x}) = \exp \left(\frac{i\pi \vec{x} \vec{\sigma}}{(\vec{x}^2 + \lambda^2)^{\frac{1}{2}}} \right), \quad (1.69)$$

$$U(\vec{x}) = \frac{(\lambda \vec{\sigma} + i\vec{x})^2}{\vec{x}^2 + \lambda^2} \quad (1.70)$$

angegeben, wobei die mit einem Pfeil gekennzeichneten Gößen dreidimensionale Vektoren sind. Zur Berechnung der Windungszahl wird in dieser Darstellung die Oberflächenintegration durch eine Volumenintegration ersetzt:

$$Q = \frac{1}{24\pi^2} \int d^3x \epsilon_{\mu\nu\lambda} Tr(A_\mu A_\nu A_\lambda) \quad (1.71)$$

$$A_\mu = U(\vec{x})(\partial_\mu U^{-1}(\vec{x})). \quad (1.72)$$

Abbildungen mit höherer Windungszahl Q sind auch hier wieder homotop zu Produkten der obigen Abbildungen. Diese Darstellung wird bei der Betrachtung von Tunnelprozessen hilfreich sein.

Zurückkehrend zu dem ursprünglichen Problem soll die folgende alternative Schreibweise für Q erarbeitet werden:

$$Q = -\frac{1}{16\pi^2} \int d^4x Tr \left(F_{\mu\nu} \tilde{F}_{\mu\nu} \right). \quad (1.73)$$

Dies wird in zwei Schritten erfolgen:

1. Umwandlung des obigen Integrals in ein Oberflächenintegral
2. Identifikation der dabei auftretenden Stromdivergenz $\partial_\mu j_\mu$ als Windungszahl-dichte

$$q(x) := -\frac{1}{16\pi^2} \text{Tr} \left(F_{\mu\nu} \tilde{F}_{\mu\nu} \right). \quad (1.74)$$

Unter Ausnutzung der Bianchi-Identität stellt sich der obige Ausdruck dar als

$$-16\pi^2 q(x) = \text{Tr} \left(\epsilon_{\mu\nu\lambda\tau} (2\partial_\mu (A_\nu \partial_\lambda A_\tau) + \frac{2}{3} A_\nu A_\lambda A_\tau) \right) \quad (1.75)$$

und

$$j_\mu := -\frac{1}{8\pi^2} \epsilon_{\mu\nu\lambda\tau} \text{Tr} \left(A_\nu (\partial_\lambda A_\tau + \frac{2}{3} A_\lambda A_\tau) \right) \quad (1.76)$$

$$q(x) = \partial_\mu j_\mu \quad (1.77)$$

$$Q = \int d^4x \partial_\mu j_\mu \quad (1.78)$$

$$= \oint_{S^3_{phys}} d\sigma_\mu j_\mu. \quad (1.79)$$

Unter Beachtung der Randbedingung $F_{\mu\nu}(r = \infty) = 0$ ergibt sich:

$$j_\mu^{\mathbb{S}^3_{phys}} = \frac{1}{24\pi^2} \epsilon_{\mu\nu\lambda\tau} \text{Tr} (A_\nu A_\lambda A_\tau) \quad (1.80)$$

$$Q = \frac{1}{24\pi^2} \oint_{S^3_{phys}} d\sigma_\mu \epsilon_{\mu\nu\lambda\tau} \text{Tr} (A_\nu A_\lambda A_\tau). \quad (1.81)$$

Mit dem asymptotischen Verhalten der A_μ

$$A_\mu \xrightarrow{r \rightarrow \infty} U(\partial_\mu U^{-1}) \quad (1.82)$$

folgt

$$Q = \frac{1}{24\pi^2} \oint_{S^3_{phys}} d\sigma_\mu \epsilon_{\mu\nu\lambda\tau} \text{Tr} (U(\partial_\nu U^{-1}) U(\partial_\lambda U^{-1}) U(\partial_\tau U^{-1})), \quad (1.83)$$

so daß die ursprüngliche Formel für die Windungszahl reproduziert wird.

1.2.2 Lösung der Feldgleichungen

Zunächst einmal gilt unter Beachtung der Tatsache, daß $F_{\mu\nu}$ antihermitesch definiert wurde,

$$-\int d^4x \text{Tr}((F_{\mu\nu} \pm \tilde{F}_{\mu\nu})^2) \geq 0, \quad (1.84)$$

und mit $\text{Tr}(F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}) = \text{Tr}(\tilde{F}_{\mu\nu}\tilde{F}_{\mu\nu})$ folgt

$$-\int d^4x \text{Tr}((F_{\mu\nu})^2) \geq \mp \int d^4x \text{Tr}(F_{\mu\nu}\tilde{F}_{\mu\nu}), \quad (1.85)$$

womit sich die Abschätzung

$$S_E \geq \frac{8\pi^2}{g_0^2}|Q| \quad (1.86)$$

ergibt. S_E wird also minimal für den Fall

$$\tilde{F}_{\mu\nu} = \pm F_{\mu\nu}. \quad (1.87)$$

Die *selbst-dualen* bzw. *anti-selbst-dualen* Konfigurationen extremalisieren S_E und lösen damit die Bewegungsgleichung. Dies wird auch direkt mit Hilfe der Bianchi-Identität $D_\mu F_{\mu\nu} = \mp D_\mu \tilde{F}_{\mu\nu} = 0$ ersichtlich. Jedoch müssen nicht alle Lösungen selbst-dual bzw. anti-selbst-dual sein. In jedem Fall stellen die selbst-dualen bzw. anti-selbst-dualen Lösungen aber das absolute Minimum der Wirkung im jeweiligen Q-Sektor dar. Als Lösung dieses Problems mit Windungszahl $Q=1$ sei nun folgendes Eichfeld als Instanton angegeben:

$$A_\mu(x) = \left(\frac{r^2}{r^2 + \lambda^2} \right) U(\partial_\mu U^{-1}) \quad (1.88)$$

$$U(x) = \frac{x_o + i\vec{x}\vec{\sigma}}{r} \quad (1.89)$$

$$r^2 = x_0^2 + \vec{x}^2. \quad (1.90)$$

Hierbei ist λ ein beliebiger Parameter, der i.a. als *Instantongröße* oder *-radius* interpretiert wird. Er resultiert aus einer Skaleninvarianz der Feldgleichungen, die sich dadurch auszeichnet, daß mit $A_\mu(x)$ auch $\lambda A_\mu(\lambda x)$ für $\lambda \neq 0$ die Gleichungen löst. Für $r \gg \lambda$ geht A_μ offenbar in eine reine Eichung über, wie es die Randbedingungen erfordern. Es existieren auch exakte Instantonlösungen mit beliebiger Windungszahl Q . Werden Instantonen und Antiinstantonen nicht unterschieden, so gibt $|Q|$ gerade die Instantanzahl K an. Zusätzlich werden auch wie im quantenmechanischen Fall Superpositionen der Ein-Instantonlösungen als näherungsweise Lösungen der Bewegungsgleichungen betrachtet.

1.2.3 Vakuum-Tunnelprozesse und θ -Vakuum

Analog zum quantenmechanischen Fall soll nun festgestellt werden, zwischen welchen klassischen Vakuumzuständen eine zeitliche Entwicklung der Instantonlösungen erfolgt [3], [12], [13]. Hierbei ist das Vakuum durch die Bedingung $F_{\mu\nu} = 0$ definiert. Bisher wurde als Randbedingung gefordert, daß das Vakuum außerhalb einer hinreichend großen Sphäre vorliegt. Äquivalent kann auch die Annahme des Vakuums

außerhalb eines genügend großen Zylinders gefordert werden, d.h. für die Region, in der

$$t < -\frac{T}{2} \quad \vee \quad t > \frac{T}{2}, \quad |\vec{x}| > R \quad (1.91)$$

gilt. Nun soll die Eichfixierungsbedingung

$$A_0(x) = 0 \quad \forall x \quad (1.92)$$

erfüllt sein. Damit bleibt jedoch weiterhin die Freiheit erhalten, zeitunabhängige Eichtransformationen durchzuführen

$$\partial_0 U(\vec{x}) = 0 \quad (1.93)$$

$$A_0 \longrightarrow U(\vec{x}) A_0 U^{-1}(\vec{x}) + U(\vec{x})(\partial_0 U^{-1}(\vec{x})), \quad (1.94)$$

so daß das Vakuum durch ein zeitunabhängiges reines Eichfeld beschrieben wird:

$$A_i(x) = A_i(\vec{x}) = U(\vec{x})(\partial_i U^{-1}(\vec{x})) = -(\partial_i U(\vec{x}))U^{-1}(\vec{x}). \quad (1.95)$$

Zur Zeit $t = -\frac{T}{2}$ kann die verbleibende Eichfreiheit genutzt werden, um z.B. $A_i(\vec{x}) = 0$ zu wählen (durch $U(\vec{x}) = 1$). Mit der Vakuumbedingung $F_{\mu\nu} = 0$ folgt $F_{0i} = \partial_0 A_i = 0$. Damit verschwindet das Eichfeld für den gesamten Bereich außerhalb des Zylinders, d.h. im Vakuum. Der Schnitt durch den Zylinder bei $t = -\frac{T}{2}$ entspricht so einer dreidimensionalen Scheibe deren Begrenzung mit einem Punkt identifiziert werden kann. Die Eichtransformationen auf einer solchen Scheibe können wie oben diskutiert durch folgende Formel (bis auf Homotopie) angegeben werden:

$$U(\vec{x}) = \exp \left(n \frac{i\pi \vec{x} \vec{\sigma}}{(\vec{x}^2 + \lambda^2)^{\frac{1}{2}}} \right). \quad (1.96)$$

Die Vakuumzustände zerfallen damit ebenfalls in verschiedene Homotopieklassen, die durch eine Windungszahl n indiziert werden. Sei also $\{|n\rangle\}$ die Menge der Vakuumzustände. Die Behauptung ist nun

$$A_i^{inst}(\vec{x}, x_0 = -\infty) = A_i(\vec{x}) \quad \text{von} \quad |n\rangle \quad (1.97)$$

$$A_i^{inst}(\vec{x}, x_0 = \infty) = A_i(\vec{x}) \quad \text{von} \quad |n + Q\rangle, \quad (1.98)$$

wobei eine genauere Begründung in [13] gegeben wird.

Eine Instantonlösung der Windungszahl Q verbindet offenbar klassische Vakuua, die sich in ihrer Windungszahl um Q unterscheiden. Das klassische YANG-MILLS-Vakuum ist also unendlich entartet, in der quantisierten Theorie treten jedoch Tunnelprozesse auf, so daß der tatsächliche Vakuumzustand eine geeignete Überlagerung der klassischen Vakuumzustände ist. Die Vakuum-Vakuum-Übergangsamplituden sind durch ($\hbar = 1$)

$$\langle n | e^{-\hat{H}T} | m \rangle = \int [dA]_{Q=n-m} \exp(-S_E) \quad (1.99)$$

gegeben. Die Vakuumzustände $\{|n\rangle\}$ verhalten sich unter Eichtransformationen $U^{(1)}$ mit Windungszahl 1 folgendermaßen

$$U^{(1)}|n\rangle = |n+1\rangle, \quad (1.100)$$

während Eichinvarianz

$$[U^{(1)}, \hat{H}] = 0 \quad (1.101)$$

bedeutet. Der neue Vakuumzustand muß eine geeignete Überlagerung der klassischen Vakuumzustände sein und insbesondere Eigenzustand von \hat{H} . Aufgrund der obigen Kommutatorrelation muß er aber auch Eigenzustand von $U^{(1)}$ mit Eigenwert der Form $e^{-i\theta}$ sein ($U^{(1)}$ ist unitär). Damit muß der neue Vakuumzustand $|\theta\rangle$ die Gestalt

$$|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta} |n\rangle \quad (1.102)$$

haben. Schließlich soll die Vakuum-Vakuum-Übergangsamplitude im Pfadintegralformalismus bestimmt werden:

$$\langle \theta' | e^{-\hat{H}T} | \theta \rangle = \delta(\theta - \theta') Z(\theta). \quad (1.103)$$

Die Rechnung

$$\begin{aligned} \langle \theta' | e^{-\hat{H}T} | \theta \rangle &= \sum_{n,m} e^{-im\theta'} e^{in\theta} \langle m | e^{-\hat{H}T} | n \rangle \\ &= \sum_{n,m} e^{-i(m-n)\theta} e^{im(\theta-\theta')} \int [dA]_{m-n} e^{-S_E} \\ &= \delta(\theta - \theta') \sum_{Q=m-n} e^{-iQ\theta} \int [dA]_Q e^{-S_E} \end{aligned}$$

liefert

$$Z(\theta) = \sum_Q \int [dA]_Q \exp \left(- \int \mathcal{L}_{eff} d^4x \right) \quad (1.104)$$

$$\mathcal{L}_{eff}^E = \mathcal{L}^E - \frac{i\theta}{16\pi^2} Tr \left(F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu} \right). \quad (1.105)$$

Im Minkowskischen Fall führt dies auf die effektive Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_{eff} = \mathcal{L} + \frac{\theta}{16\pi^2} Tr \left(F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu} \right). \quad (1.106)$$

Für $\theta \neq 0$ ist die effektive Lagrange-Dichte nicht invariant unter P- und T- Transformationen, so daß die entsprechenden Symmetrien in dieser Theorie gebrochen sind.

Bemerkenswert ist, daß jedes θ -Vakuum eine „eigene Welt“ darstellt, die nicht etwa eine Anregung eines einzigen Vakuums ist. Die unterschiedlichen θ -Vakua sind physikalisch nicht verbunden.

Dies wird durch folgende Überlegung klar, wobei $U^{(1)}$ eine Eichtransformation und B einen beliebigen physikalischen Operator repräsentiert.

$$\begin{aligned} [U^{(1)}, B] &= 0 \\ \Rightarrow 0 &= \langle \theta' | [U^{(1)}, B] | \theta \rangle \\ &= \langle \theta' | B | \theta \rangle (e^{i\theta'} - e^{-i\theta}) \\ \stackrel{\theta' \neq \theta}{\Rightarrow} \langle \theta' | B | \theta \rangle &= 0. \end{aligned}$$

1.2.4 Die Bedeutung der Radiuskoordinate λ unter den kollektiven Koordinaten $\{\xi_i\}$

In diesem Abschnitt ist zu überlegen, welche Form die Zustandssumme Z in Sattelpunktsnäherung haben muß. Dabei wird nicht zwischen Instantonen und Antiinstantonen unterschieden, so daß die Windungszahl Q einer Instantonlösung gleich ihrer Instantanzahl K ist. Betrachtet wird ein K -Instantonbeitrag in Anlehnung an die Näherung des verdünnten Gases [14]:

$$Z_K = \frac{1}{K!} (\sqrt{2\pi} g_0)^{-mK} e^{-K \frac{S_0}{g_0^2}} \int d\xi_i J(\xi_i) \left(\frac{\det' \Delta_K}{\det \Delta_0} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.107)$$

Hierbei sind

$\det' \Delta_K$	nullmodenfreie K -Instanton-Fluktuationsdeterminante
$\det \Delta_0$	Vakuumfluktuationen
S_0	Ein-Instanton-Wirkung
m	Anzahl der kollektiven Koordinaten ξ_i
J	Jacobi-Determinante.

Jede der kollektiven Koordinaten $\{\xi_i\}$ repräsentiert eine Invarianz der Feldgleichungen. So sind u.a. Integrationen über die Raum-Zeit sowie das Gruppenvolumen enthalten. Dabei möglicherweise auftretende Divergenzen bereiten keine Probleme, da ohnehin eine Normierung auf das betrachtete Volumen bzw. die verstrichene Zeit vorzunehmen ist, um die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten bzw. Übergangsrasen zu erhalten. Die Koordinaten unter den $\{\xi_i\}$, die die Raum-Zeit parametrisieren, werden mit $\{\mathbf{a}_j\}$ bezeichnet, wobei $j \in \{1, \dots, K\}$ die Instantonkoordinaten numeriert.

Im Rahmen einer Eichtheorie sind unter den kollektiven Koordinaten $\{\xi_i\}$ auch die Größen- oder Radiusparameter $\{\lambda_j\}$. Liegen Instantonen mit beliebigem Radius vor,

so divergiert das Integral über diese Koordinaten. Im allgemeinen wird dieses Problem durch die Einführung eines willkürlichen Cutoff im Integral umgangen. Dies hat allerdings nur dann eine Rechtfertigung, wenn die Verteilung der Radien bei großen Werten hinreichend schnell abfällt. Abgesehen von den Inkonsistenzen im Zusammenhang mit der Renormierungsgruppe stellt sich die Frage, an welcher Stelle ein Cutoff zu guten Ergebnissen führt.

Bevor weiter auf diese Probleme eingegangen wird, ist noch zu beachten, daß sich die Kopplung bei der Renormierung der Determinanten in Einschleifenordnung verhält wie

$$\frac{1}{g_0^2} \longrightarrow \frac{1}{g^2(\mu)} - 2\beta_0 \ln(\mu), \quad (1.108)$$

was mit den Ersetzungen

$$\begin{aligned} \kappa &= 2\beta_0 S_0 \\ \Lambda &= \mu \exp\left(-\frac{1}{2\beta_0 g^2(\mu)}\right) \end{aligned}$$

zu

$$Z_K = \frac{1}{K!} (\sqrt{2\pi}g)^{-mK} \Lambda^{K\kappa} \int d\xi_i e^{-\tilde{U}(\xi_i)} \quad (1.109)$$

führt mit einem zunächst nicht näher bestimmten Potential \tilde{U} [1], [14]. Hierbei wird die Abhängigkeit der Kopplungskonstante g von den kollektiven Koordinaten $\{\xi_i\}$ vernachlässigt und entsprechend nicht bei den Integrationen berücksichtigt.

1.3 Das Instanton-Hard-Core-Gas

Um an dieser Stelle weiterzukommen, sind einige Vereinfachungen nötig. Zunächst wird $Z_K(V)$ unter Hinzunahme von Dimensionsargumenten folgendermaßen geschrieben:

$$\begin{aligned} Z_K(V) &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi}g)^{mK}} \frac{\tilde{C}^K}{K!} \int \prod_{j=1}^K \frac{d\mathbf{a}'_j d\lambda'_j}{\lambda'^{\nu+1}_j} \prod_{j=1}^K (\Lambda \lambda'_j)^\kappa e^{-\tilde{U}(\{\mathbf{a}'_j\}, \{\lambda'_j\})} \\ &= \frac{C^K}{K!} \Lambda^{\kappa K} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}'_j d\lambda'_j \prod_{j=1}^K \lambda'^{\kappa-\nu-1} e^{-\tilde{U}(\{\mathbf{a}'_j\}, \{\lambda'_j\})} \end{aligned} \quad (1.110)$$

\tilde{C}	Integral über die verbleibenden kollektiven Koordinaten eines Instantons
C	$= \frac{\tilde{C}}{(\sqrt{2\pi}g)^m}$
ν	Raum-Zeit-Dimension.

Die Raum-Zeit- und Radiuskoordinaten unter den $\{\xi_i\}$ werden nun explizit betrachtet, während der Beitrag der verbleibenden kollektiven Koordinaten durch \tilde{C} repräsentiert wird.

Da $\kappa - \nu - 1 \geq 0$ [14], liegen die wesentlichen Beiträge zu $Z_K(V)$ in einem Bereich, in dem die Instantonradien $\{\lambda'_j\}$ groß sind. Dies entspricht der Vorstellung eines dichten Gases aus Instantonen an den Positionen $\{\mathbf{a}'_j\}$ und führt zu Divergenzen in den λ' -Integrationen. Dies soll hier nicht durch einen willkürlichen Cutoff in den Radiuskoordinaten behandelt werden, der insbesondere nicht konsistent ist mit den Vorgaben der Renormierungsgruppe [15]. Eine dynamische und selbstkonsistente Beschränkung der Instantongrößen kann auch durch die Einführung einer repulsiven Wechselwirkung bei kleinen Abständen erzwungen werden. Die einfachste Realisierung ist durch die Ersetzung von \tilde{U} durch ein Hard-Core-Potential U gegeben. Die Instantonen können sich so nicht durchdringen und sind entsprechend nicht in der Lage, sich beliebig auszudehnen. Mit der Anschauung eines Gases harter Kugeln mit Radien $\{\lambda'_j\}$ an den Raum-Zeit-Punkten $\{\mathbf{a}'_j\}$ ergibt sich der folgende Ausdruck für $Z_K(V)$:

$$Z_K(V) = \frac{C^K}{K!} \Lambda^{\kappa K} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}'_j d\lambda'_j \prod_{j=1}^K \lambda'^{\kappa-\nu-1} e^{-U(\{\mathbf{a}'_j\}, \{\lambda'_j\})} \quad (1.111)$$

$$= \frac{C^K}{K!} \Lambda^{\kappa K} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}'_j d\lambda'_j \prod_{j=1}^K \lambda'^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}'_j\}, \{\lambda'_j\}) \quad (1.112)$$

$$\Theta(\{\mathbf{a}'_j\}, \{\lambda'_j\}) = \begin{cases} 1 & \begin{aligned} 1. & \|\mathbf{a}'_j - \mathbf{a}'_i\| > \left(\frac{\tau}{v_1}\right)^{\frac{1}{\nu}} (\lambda'_j + \lambda'_i) \quad \forall i, j \\ 2. & |a'^{\mu}_j| < \frac{1}{2} V'^{\frac{1}{\nu}} \quad \mu = 1, \dots, \nu \quad \forall j \\ 3. & 0 < \lambda'_j < \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V'\right)^{\frac{1}{\nu}} \quad \forall j \end{aligned} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$v_1 = \frac{\pi^{\frac{\nu}{2}}}{\Gamma(\frac{\nu}{2}+1)}$ Volumen der Einheitskugel in ν Dimensionen

$\tau \lambda'^{\nu}_j$ effektives Volumen eines Instantons

V' Beobachtungsvolumen.

Die Integrationen bzgl. der Koordinaten $\{\mathbf{a}'_j\}$ erfolgen über das Volumen V' , diejenigen bzgl. der Parameter $\{\lambda'_j\}$ erfolgen über \mathbb{R}^+ .

Nun ist es zweckmäßig mit dimensionslosen Größen zu arbeiten. Dazu werden alle Längen in Einheiten von Λ^{-1} gemessen, was der Umskalierung

$$\lambda' = \Lambda^{-1} \lambda$$

$$\mathbf{a}' = \Lambda^{-1} \mathbf{a}$$

$$V' = \Lambda^{-\nu} V$$

entspricht. Damit stellt sich $Z_K(V)$ dar als:

$$Z_K(V) = \frac{C^K}{K!} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \quad (1.113)$$

$$\Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) = \begin{cases} 1 & \begin{array}{l} 1. \quad \|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i\| > \left(\frac{\tau}{v_1}\right)^{\frac{1}{\nu}} (\lambda_j + \lambda_i) \quad \forall i, j \\ 2. \quad |a_j^\mu| < \frac{1}{2} V^{\frac{1}{\nu}} \quad \mu = 1, \dots, \nu \quad \forall j \\ 3. \quad 0 < \lambda_j < \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V\right)^{\frac{1}{\nu}} \quad \forall j \end{array} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

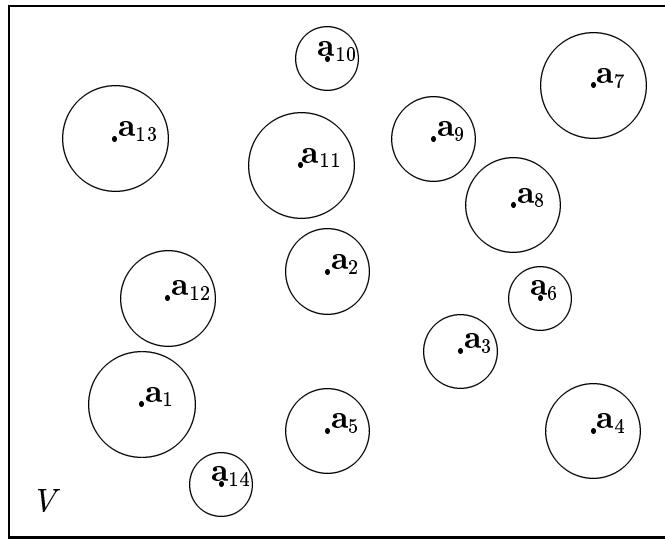


Abbildung 1.2: Instantongas mit $K = 14$, $\nu = 2$ im Volumen V

Abbildung 1.2 stellt eine mögliche Gaskonfiguration aus harten Kugeln dar. Hier ist zu beachten, daß sich neben den Positionen auch die Radianen der Teilchen im Rahmen der einschränkenden Randbedingungen, die durch $\Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\})$ festgelegt werden, beliebig einstellen können. Da aber auch die Instantonzahl K variabel sein soll, ist ein großkanonisches Ensemble von Instantonen mit der Zustandssumme

$$Z(V) = \sum_{K=0}^{\infty} Z_K(V) \quad Z_0(V) = 1 \quad (1.114)$$

zu untersuchen, wobei $\mathcal{P}_K(V)$ die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, daß das offene System K Instantonen enthält:

$$\mathcal{P}_K(V) = \frac{Z_K(V)}{Z(V)}. \quad (1.115)$$

Von Interesse ist nun die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Instanton mit Radius λ in einem solchen Ensemble auftritt. Dazu werden zunächst allgemeinere Überlegungen angestellt.

1.4 Die Verteilung der Instantonradien

Um die Beschreibung im folgenden möglichst transparent zu gestalten, werden die Koordinaten eines Instantons zusammengefaßt zu

$$\vec{A}_j = (\mathbf{a}_j, \lambda_j) \quad (1.116)$$

$$\{\vec{A}_j\}^K = (\vec{A}_1, \dots, \vec{A}_K), \quad (1.117)$$

wobei der Frage nachgegangen wird, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Instanton an der Position \vec{A} anzutreffen ist. In Systemen der klassischen Statistischen Physik wird dies in [16] und [17] behandelt.

1.4.1 Die Verteilung im kanonischen Ensemble

Für die folgenden Überlegungen wird zunächst angenommen, daß die Instantonen im vorliegenden Gas unterscheidbar sind. Dann wird die Wahrscheinlichkeit, Instanton 1 im Volumenelement dA_1 bei \vec{A}_1 , Instanton 2 in dA_2 bei \vec{A}_2 ... und Instanton n mit $n \leq K$ in dA_n an der Stelle \vec{A}_n anzutreffen, beschrieben durch die Randverteilung

$$\frac{C^K \int dA_{n+1} \dots dA_K \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\})}{Z_K^d(V)} \quad (1.118)$$

mit

$$Z_K^d(V) = C^K \int dA_1 \dots dA_K \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) = K! Z_K(V). \quad (1.119)$$

In einem nächsten Schritt stellt sich die Frage nach der Wahrscheinlichkeit, ein beliebiges Instanton in dA_1 an Position \vec{A}_1 ... sowie in dA_n an der Stelle \vec{A}_n vorzufinden, da sie tatsächlich nicht unterscheidbar sind. Mit Hilfe leichter kombinatorischer Argumente wird deutlich, daß die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte $\bar{\rho}_K^n(\vec{A}_1, \dots, \vec{A}_n)$ gegeben ist durch

$$\bar{\rho}_K^n(V, \vec{A}_1, \dots, \vec{A}_n) = \frac{K!}{(K-n)!} \frac{C^K \int dA_{n+1} \dots dA_K \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\})}{Z_K^d(V)}. \quad (1.120)$$

Da nun speziell von Interesse ist, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Instanton mit Radius λ anzutreffen ist, wird der folgende Ausdruck ausgewertet:

$$\bar{\rho}_K(V, \lambda) = \int d\mathbf{a}_1 \bar{\rho}_1^1(V, \vec{A}_1) \quad (1.121)$$

$$= K \frac{C^K \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=2}^K d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\})}{Z_K^d(V)}$$

$$= K \frac{C^K \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=1}^{K-1} d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\})}{Z_K^d(V)}$$

$$= K \frac{Z_K^{red}(V, \lambda)}{Z_K(V)} \quad (1.122)$$

mit

$$Z_K^{red}(V, \lambda) = \frac{C^K}{K!} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=1}^{K-1} d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-\nu-1} \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}), \quad (1.123)$$

wobei der Übersichtlichkeit wegen $\lambda_K = \lambda$ gesetzt wurde. Insgesamt ist $\bar{\rho}_K$ auf die Teilchenzahl K normiert. $\bar{\rho}_K$ ist keine normierte Wahrscheinlichkeitsdichte im üblichen Sinn, denn es wird nicht nach der Wahrscheinlichkeit gefragt bei einer Stichprobe ein Instanton mit Radius λ auszuwählen. Vielmehr wird die gesamte Konfiguration betrachtet und nach der Summe der K Wahrscheinlichkeiten gefragt, daß in diesem System das K -te Instanton den Radius λ besitzt.

Dies entspricht experimentell der Aufnahme eines Histogramms. Der Bereich der möglichen Radien wird entsprechend einer vorgegebenen Auflösung diskretisiert. Für eine gegebene Konfiguration von K Instantonen mit Radien $\lambda_1, \dots, \lambda_K$ liefert jeder dieser Werte einen Beitrag zum Histogramm. Somit trägt eine Konfiguration aus K Instantonen mit einem relativen Gewicht K zum Histogramm bei. Dieser Faktor wird wichtig, wenn das großkanonische Ensemble betrachtet wird, bei dem K variabel ist.

1.4.2 Die Verteilung im großkanonischen Ensemble

Wird nun ausgehend vom kanonischen Fall eine Variation der Teilchenzahl zugelassen, so werden Konfigurationen mit Teilchenzahl K entsprechend der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens bei der Aufnahme eines Histogramms berücksichtigt. Da die Wahrscheinlichkeit, in einem offenen System K Instantonen anzutreffen, gegeben ist durch

$$\mathcal{P}_K(V) = \frac{Z_K(V)}{Z(V)}, \quad (1.124)$$

folgt

$$\begin{aligned} \bar{\rho}^n(\vec{A}_1, \dots, \vec{A}_n) &= \sum_{K \geq n} \mathcal{P}_K(V) \bar{\rho}_K^n(\vec{A}_1, \dots, \vec{A}_n) \\ &= \frac{1}{Z(V)} \sum_{K \geq n} Z_K(V) \bar{\rho}_K^n(\vec{A}_1, \dots, \vec{A}_n). \end{aligned} \quad (1.125)$$

Entsprechend wird offenbar die Wahrscheinlichkeit, ein Instanton mit Radius λ bei der Erfassung eines großkanonischen Ensembles zu finden, durch folgenden Erwartungswert beschrieben

$$\bar{\rho}(V, \lambda) = \sum_{K=1}^{\infty} \mathcal{P}_K(V) \bar{\rho}_K(V, \lambda) \quad (1.126)$$

$$= \frac{1}{Z(V)} \sum_{K=1}^{\infty} K Z_K^{red}(V, \lambda), \quad (1.127)$$

wobei $\bar{\rho}$ aufgrund der gewählten Betrachtungsweise auf den Erwartungswert der Instantonzahl normiert ist

$$\int_0^\infty \bar{\rho}(V, \lambda) d\lambda = \langle K \rangle_V, \quad (1.128)$$

welcher linear mit V wächst. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\bar{\rho}$ ist also durch das betrachtete Volumen V zu dividieren, womit sich der gewünschte Ausdruck für die Verteilung der Instantonradien in einem großkanonischen Ensemble ergibt:

$$\begin{aligned} \rho(V, \lambda) &= \frac{\bar{\rho}(V, \lambda)}{V} \\ &= \frac{1}{Z(V)V} \sum_{K=1}^{\infty} K Z_K^{red}(V, \lambda) \end{aligned} \quad (1.129)$$

In den folgenden Kapiteln wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung ρ sowohl mit Hilfe von analytischen als auch numerischen Ansätzen untersucht werden. In einem ersten Schritt wird nun der eindimensionale Fall betrachtet, der sich im thermodynamischen Limes noch analytisch exakt behandeln lässt.

Um Abhängigkeiten klar zu machen, soll dabei im folgenden der Ausdruck für die Funktionswerte $\rho(V, \lambda)$ weiter gefaßt werden und ggf. die Funktion ρ selbst bezeichnen.

Kapitel 2

Das eindimensionale Instanton-Gas

Ziel dieses Kapitels ist es, Aussagen über die Verteilung der Instantonradien in einem eindimensionalen Gas zu machen, wie es allgemein in Abschnitt 1.3 eingeführt wurde. Die K -Instantonbeiträge zur Zustandssumme nehmen in diesem Fall die Form

$$Z_K(L) = \frac{C^K}{K!} \int \prod_{j=1}^K da_j d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^{\kappa-2} \Theta(\{a_j\}, \{\lambda_j\}) \quad (2.1)$$

$$\Theta(\{a_j\}, \{\lambda_j\}) = \begin{cases} 1 & \begin{array}{l} 1. \quad |a_j - a_i| > \left(\frac{\tau}{2}\right) (\lambda_j + \lambda_i) \\ 2. \quad |a_j| < \frac{1}{2}L \quad \forall j \\ 3. \quad 0 < \lambda_j < \frac{L}{\tau} \quad \forall j \end{array} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

an, wobei die Beobachtungslänge hier mit L bezeichnet wird, während das Volumen der Einheitskugel in einer Dimension gerade 2 ist.

In einem ersten Schritt werden nun die Integrationen im kanonischen K -Instanton-Ensemble durchgeführt und deren Resultate im großkanonischen Formalismus entsprechend Kapitel 1.4 zur Verteilung $\rho(L, \lambda)$ aufsummiert. Danach wird ein im thermodynamischen Limes exakter Ausdruck $\rho(\lambda)$ für die so gewonnene Verteilung erarbeitet.

2.1 Die Verteilung der Instantonradien

Bei der Auswertung der Integrale in Formel (2.1) zur Bestimmung der Verteilung $\rho(L, \lambda)$ hilft die Anschauung einer gewichteten Integration über die Konfigurationen von K Stäben an den Orten $\{a_j\}$ mit Längen $\{\tau\lambda_j\}$. Die Randbedingungen geben vor, daß sich diese Stäbe weder gegenseitig überlappen dürfen, noch ein Austreten aus dem Bereich der Länge L möglich ist.

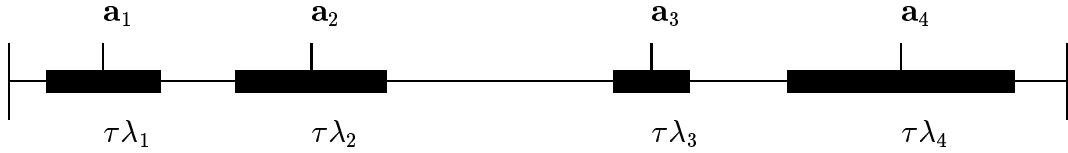


Abbildung 2.1: Eindimensionales Instantongas, $K = 4$

In Abbildung 2.1 ist dies exemplarisch für den Fall $K = 4$ dargestellt. Insbesondere liegt dort bereits ein geordnetes Tupel vor, wie es bei der Auswertung der Integrale herangezogen werden wird. Im weiteren werden folgende Schreibweisen verwendet:

$$\alpha = \kappa - 2 \quad (2.2)$$

$$I_K(L) = \frac{1}{K!} \int \prod_{j=1}^K da_j d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha \Theta(\{a_j\}, \{\lambda_j\}) \quad (2.3)$$

$$\bar{I}_K(L) = \frac{1}{K!} \int \prod_{j=1}^K da_j \Theta(\{a_j\}, \{\lambda_j\}). \quad (2.4)$$

Integration über die Instantonpositionen

Die Berechnung von $\bar{I}_K(L)$ liefert die Integration über die Positionen der Instantonen:

$$\begin{aligned} \bar{I}_K(L) &= \int_{u(K-1)}^{L-\frac{\tau}{2}\lambda_K} da_K \int_{u(K-2)}^{a_K-\frac{\tau}{2}\lambda_K-\frac{\tau}{2}\lambda_{K-1}} da_{K-1} \dots \int_{\frac{\tau}{2}\lambda_1}^{a_2-\frac{\tau}{2}\lambda_2-\frac{\tau}{2}\lambda_1} da_1 \quad (2.5) \\ u(i) &= \tau \sum_{j=1}^i \lambda_j + \frac{\tau}{2} \lambda_{i+1}. \end{aligned}$$

Auf der rechten Seite der obigen Gleichung wird bereits ein angeordnetes Ensemble von Instantonen betrachtet, so daß der kombinatorische Faktor $\frac{1}{K!}$, der ihre Ununterscheidbarkeit ausdrückt, entfällt. Induktiv wird der Wert dieses Integrales ermittelt zu (vgl. Anhang A)

$$\bar{I}_K(L) = \frac{1}{K!} (L - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j)^K. \quad (2.6)$$

Dies liefert also anschaulich das freie Volumen für K ununterscheidbare Stäbe auf einer Strecke der Länge L . Auszuführen bleibt die

Integration über die Instantonradien:

$$I_K(L) = \frac{1}{K!} \int_0^\infty \prod_{j=1}^K d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha \bar{\Theta}(\{\lambda_j\})(L - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j)^K \quad (2.7)$$

$$\bar{\Theta}(\{\lambda_j\}) = \begin{cases} 1 & \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j \leq L \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.8)$$

Dies kann einfacher geschrieben werden:

$$I_K(L) = \frac{1}{K!} \int_0^{\frac{L}{\tau}} d\lambda_K \dots \int_0^{\frac{L}{\tau} - \sum_{j=2}^K \lambda_j} d\lambda_1 \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha (L - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j)^K. \quad (2.9)$$

Offensichtlich kann dieser Ausdruck nur für $\alpha > -1$ konvergieren. Für $\alpha \in \mathbb{N}_0$ kann dies sukzessive durch partielle Integration mit dem Ergebnis

$$I_K(L) = \frac{(\alpha!)^K}{((\alpha+2)K)!} \frac{1}{\tau^{(\alpha+1)K}} L^{(\alpha+2)K} \quad \alpha \in \mathbb{N}_0 \quad (2.10)$$

ausgewertet werden. Um das Integral für beliebige reelle Exponenten $\alpha > -1$ zu bestimmen, ist die Formel [18]

$$\int_0^1 x^a (1-x)^b dx = \frac{\Gamma(a+1)\Gamma(b+1)}{\Gamma(a+b+2)} \quad (2.11)$$

von Nutzen und liefert die Erweiterung der obigen Beziehung ($\alpha \in \mathbb{R}$, $\alpha > -1$, vgl. Anhang A)

$$I_K(L) = \frac{\Gamma(\alpha+1)^K}{\Gamma((\alpha+2)K+1)} \frac{1}{\tau^{(\alpha+1)K}} L^{(\alpha+2)K}. \quad (2.12)$$

Während nun

$$Z_K(L) = C^K I_K(L), \quad (2.13)$$

ist auch $Z_K^{red}(L, \lambda)$ mit

$$Z_K^{red}(L, \lambda) = C^K I_K^{red}(L, \lambda) \quad (2.14)$$

von Interesse, was gegenüber den Größen Z_K und I_K dem Auslassen einer λ -Integration entspricht. Die Rechnung ergibt hier ($\alpha \in \mathbb{R}$, $\alpha > -1$, vgl. Anhang A)

$$I_K^{red}(L, \lambda) = \frac{(\Gamma(\alpha+1))^{(K-1)}}{\Gamma((\alpha+2)(K-1)+2)} \frac{1}{\tau^{(\alpha+1)(K-1)}} \lambda^\alpha (L - \tau \lambda)^{(\alpha+2)(K-1)+1}. \quad (2.15)$$

Die Verteilung $\rho(L, \lambda)$

Zu betrachten ist nun

$$\rho(L, \lambda) = \frac{1}{Z(L)L} \sum_{K=1}^{\infty} K Z_K^{red}(L, \lambda) \quad (2.16)$$

$$Z(L) = \sum_{K=0}^{\infty} Z_K(L), \quad (2.17)$$

wobei $Z_0(L) = 1$ in Übereinstimmung mit (2.12), so daß $\rho(L, \lambda)$ die Form

$$\rho(L, \lambda) = \frac{1}{L} \frac{\sum_{K=1}^{\infty} K C^K I_K^{red}(L, \lambda)}{\sum_{K=0}^{\infty} C^K I_K(L)} \quad (2.18)$$

nimmt und sich mit der Ersetzung

$$\gamma = \frac{C\Gamma(\alpha + 1)}{\tau^{\alpha+1}} \quad (2.19)$$

darstellt als

$$\boxed{\rho(L, \lambda) = \frac{\sum_{K=1}^{\infty} K C \gamma^{K-1} \frac{1}{\Gamma((\alpha+2)(K-1)+2)} \lambda^{\alpha} (L - \tau \lambda)^{(\alpha+2)(K-1)+1}}{\sum_{K=0}^{\infty} \gamma^K \frac{1}{\Gamma((\alpha+2)K+1)} L^{(\alpha+2)K+1}}} \quad (2.20)$$

$(\alpha \in \mathbb{R}, \alpha > -1).$

2.2 Der thermodynamische Limes

Die im vorangegangenen Abschnitt hergeleitete Formel (2.20) ist in dieser Form exakt, jedoch können ihr nicht ohne weiteres Informationen über die Verteilung der Instantonradien entnommen werden. Nur Aussagen über das Verhalten von $\rho(L, \lambda)$ für kleine Werte von λ sind direkt zu gewinnen. Hier verschwindet die Verteilung nach einem Potenzgesetz, d.h.

$$\rho(L, \lambda) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} const. \lambda^{\alpha} \quad (2.21)$$

$$\alpha = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\ln(\rho(L, \lambda))}{\ln(\lambda)}. \quad (2.22)$$

Um dies zu sehen, wird der Ausdruck $(L - \tau \lambda)^{(\alpha+2)(K-1)+1}$ im Zähler von $\rho(L, \lambda)$ in eine Taylorreihe um $\lambda = 0$ entwickelt. Dies bringt das Ergebnis

$$\rho(L, \lambda) = c_0(L)\lambda^{\alpha} - c_1(L)\lambda^{\alpha+1} + c_2(L)\lambda^{\alpha+2} - \dots \quad c_i \in \mathbb{R}^+, \quad (2.23)$$

und schließlich

$$\begin{aligned}\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\ln(\rho(L, \lambda))}{\ln(\lambda)} &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\ln(\lambda^\alpha(c_0 - c_1\lambda + c_2\lambda^2 - \dots))}{\ln(\lambda)} \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\alpha \ln(\lambda) + \ln(c_0 - c_1\lambda + c_2\lambda^2 - \dots)}{\ln(\lambda)} \\ &= \alpha.\end{aligned}$$

ρ verschwindet also für kleine λ gerade mit der Potenz, mit der die λ -Faktoren in (2.1) auftreten. Dies ist unabhängig von der Größe L .

Interessanter für die Anwendung ist jedoch das Verhalten der Wahrscheinlichkeitsdichte für große Instantonradien. Aufgrund der Normierung sollte sie nach Erreichen eines bzw. mehrerer Maxima wieder abfallen. Zu fragen ist, in welcher Form die Verteilung dort verschwindet. Bei numerischer Auswertung des Ausdrucks für $\rho(L, \lambda)$ wird deutlich, daß die Orte der Maxima der Verteilung schnell, nach gewissen Einschwingprozessen für größere Exponenten α , mit wachsendem L gegen einen endlichen Wert streben. In Abbildung 2.2 wird deutlich, daß sich der Ort des Maximums für den Fall, $\alpha = 1, \tau = 2, C = 1$, im thermodynamischen Limes, d.h. für große L , gegen einen Wert von etwa 0.79 bewegt.

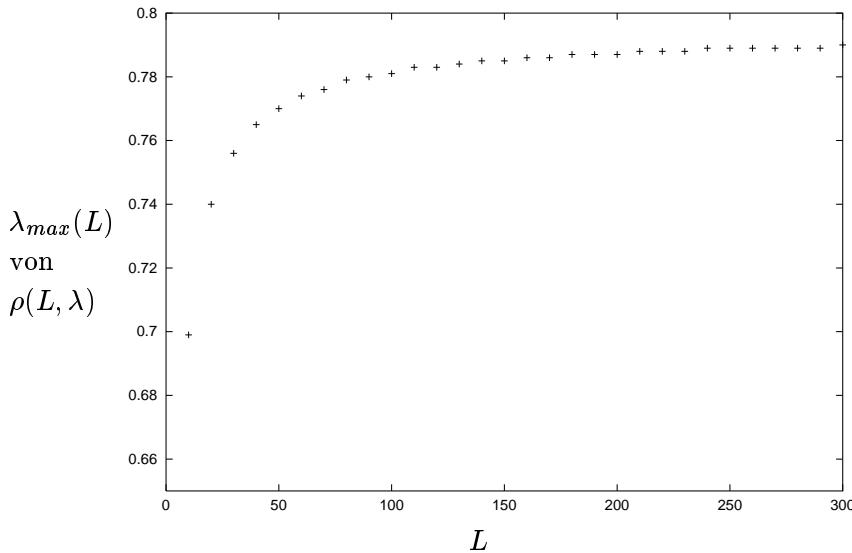


Abbildung 2.2: Ort des globalen Maximums der Verteilung $\rho(L, \lambda)$ für $\alpha = 1, \tau = 2, C = 1$ in Abhängigkeit von L

Es besteht Anlaß zu der Vermutung, daß die Verteilung selbst im thermodynamischen Limes gegen eine Grenzverteilung konvergiert, d.h.

$$\rho(L, \lambda) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \rho(\lambda), \quad (2.24)$$

so daß zu untersuchen ist, wie sich der Ausdruck (2.20) für große L verhält. Hierzu wird die folgende Näherungsformel für die Γ -Funktion herangezogen

$$\Gamma(x+1) \approx \sqrt{2\pi} \left(x + \frac{1}{2}\right)^{x+\frac{1}{2}} e^{-(x+\frac{1}{2}+\delta)}, \quad (2.25)$$

wobei δ von der Größenordnung eins ist. Die Wahl von δ ist im Falle großer Werte von x bzw. im thermodynamischen Limes der zu betrachtenden Größen irrelevant. So wird hier $\delta = 0$ gesetzt, um die Rechnungen möglichst einfach zu gestalten. Durch Einsetzen von (2.25) und Annäherung der Summen durch Integrale folgt ($\beta = \alpha + 2 = \kappa$)

$$\rho(L, \lambda) \approx \frac{C \int_0^\infty dk (k+1) \gamma^k (\beta k + \frac{3}{2})^{-(\beta k + \frac{3}{2})} e^{\beta k + 1} \lambda^\alpha (L - \tau \lambda)^{\beta k + 1}}{\int_0^\infty \gamma^k (\beta k + \frac{1}{2})^{-(\beta k + \frac{1}{2})} e^{\beta k} L^{\beta k + 1}}. \quad (2.26)$$

Bei der Betrachtung des Verhaltens der Integranden im Zähler und Nenner des obigen Ausdrucks wird deutlich, daß beide für hinreichend große Werte von L ein sehr ausgeprägtes Maximum besitzen. So erscheint eine Sattelpunktsentwicklung in diesen Punkten sinnvoll.

1. Sattelpunktsentwicklung des Nenners

$$D(L) = L \int_0^\infty dk e^{-(\beta k + \frac{1}{2}) \ln(\beta k + \frac{1}{2}) + \beta k (1 + \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L))} \quad (2.27)$$

Mit den Methoden der Analysis wird der Ort des Maximums bestimmt zu

$$k_{max} = \frac{1}{\beta} (\gamma^{\frac{1}{\beta}} L - \frac{1}{2}), \quad (2.28)$$

so daß nun die Entwicklung des Exponenten um diesen Punkt liefert:

$$D(L) \approx L e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L - \frac{1}{2})} \left(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L\right)^{-\frac{1}{2}} \int_0^\infty dk e^{-\frac{\beta^2}{2\gamma^{\frac{1}{\beta}} L} (k - k_{max})^2}. \quad (2.29)$$

Mit der Substitution $\delta = k - k_{max}$ und unter Berücksichtigung von

$$\begin{aligned} \frac{\beta^2}{2\gamma^{\frac{1}{\beta}} L} &> 0 \\ k_{max} &\gg 0 \end{aligned}$$

ergibt sich das Gauß-Integral

$$D(L) \approx L e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L - \frac{1}{2})} \left(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L\right)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^\infty d\delta e^{-\frac{\beta^2}{2\gamma^{\frac{1}{\beta}} L} \delta^2} \quad (2.30)$$

$$= L e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L - \frac{1}{2})} \left(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L\right)^{-\frac{1}{2}} \sqrt{2\pi} \left(\frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} L}{\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.31)$$

Also:

$$D(L) \approx \frac{\sqrt{2\pi}}{\beta} L e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L - \frac{1}{2})}. \quad (2.32)$$

2. Sattelpunktsentwicklung des Zählers

Mit der abkürzenden Schreibweise $\tilde{L} = L - \tau\lambda$ nimmt der Zähler die Gestalt

$$N(\tilde{L}, \lambda) = e^{\tilde{L}} C \lambda^\alpha \int_0^\infty dk e^{-(\beta k + \frac{3}{2}) \ln(\beta k + \frac{3}{2}) + \beta k (1 + \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L})) + \ln(k+1)} \quad (2.33)$$

an. Die Bestimmungsgleichung für den Ort des Maximums ist gegeben durch

$$\beta \ln(\beta k_{max} + \frac{3}{2}) - \frac{1}{k_{max} + 1} = \beta \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}), \quad (2.34)$$

und mit der Abschätzung für große \tilde{L}

$$\beta \ln(\beta k_{max} + \frac{3}{2}) \gg \frac{1}{k_{max} + 1}$$

wird sie näherungsweise gelöst durch

$$k_{max} \approx \frac{1}{\beta} \left(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} \right). \quad (2.35)$$

Analog zur Behandlung des Nenners wird auch hier der Exponent im Integranden entwickelt ($\delta = k - k_{max}$):

$$N(\tilde{L}, \lambda) \approx e^{\tilde{L}} \frac{C}{\beta} \lambda^\alpha e^{\left(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2}\right)} \left(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}\right)^{-\frac{3}{2}} \left(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta\right) \int_{-k_{max}}^\infty d\delta e^{-\frac{\beta^2}{2} \sigma^2 \delta^2}. \quad (2.36)$$

Da nun

$$\begin{aligned} k_{max} &\gg 0 \\ \sigma^2 &= \frac{1}{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}} + \frac{1}{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta)^2} > 0, \end{aligned}$$

lässt sich der obige Ausdruck als Gauß-Integral auswerten.

$$\begin{aligned} N(\tilde{L}, \lambda) &\approx \tilde{L} \frac{C \sqrt{2\pi}}{\beta^2} \lambda^\alpha e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{1}{2})} (\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L})^{-\frac{3}{2}} (\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta) \left(\frac{1}{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}} + \frac{1}{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta)^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= \tilde{L} \frac{C \sqrt{2\pi}}{\beta^2} \lambda^\alpha e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{1}{2})} (\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L})^{-1} (\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta) \left(1 + \frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}}{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta)^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= \frac{C \sqrt{2\pi}}{\beta^2} \lambda^\alpha e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{1}{2})} \gamma^{-\frac{1}{\beta}} (\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta) \left(1 + \frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}}{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta)^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

3. Die Verteilung $\rho(\lambda)$

Zusammengetragen ergeben die Resultate der obigen Rechnungen

$$\begin{aligned} \rho(L, \lambda) &\approx \frac{C}{\beta} \frac{\lambda^\alpha e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{1}{2})} \gamma^{-\frac{1}{\beta}} (\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta) \left(1 + \frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}}{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta)^2}\right)^{-\frac{1}{2}}}{L e^{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} L - \frac{1}{2})}} \\ &= \frac{C}{\beta} \lambda^\alpha e^{-\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tau \lambda} \frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta}{\gamma^{\frac{1}{\beta}} L} \left(1 + \frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}}{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta)^2}\right)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Mit $\tilde{L} = L - \tau \lambda$ folgt im thermodynamischen Limes

$$\lim_{L, \tilde{L} \rightarrow \infty} \frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta}{\gamma^{\frac{1}{\beta}} L} = 1 \quad (2.38)$$

$$\lim_{\tilde{L} \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L}}{(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{L} - \frac{3}{2} + \beta)^2}\right)^{-\frac{1}{2}} = 1, \quad (2.39)$$

womit ein Ausdruck gewonnen ist, gegen den die Verteilung (2.20) für große L konvergiert:

$$\rho(\lambda) = \frac{C}{\beta} \lambda^\alpha e^{-\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tau \lambda}. \quad (2.40)$$

Mit den Ersetzungen

$$\begin{aligned} \beta &= \alpha + 2 \\ \gamma &= \frac{C \Gamma(\alpha + 1)}{\tau^{\alpha+1}} \end{aligned}$$

lässt sich die Grenzverteilung auch in folgender einfacher Weise darstellen:

$$\boxed{\rho(\lambda) = \frac{C}{\alpha + 2} \lambda^\alpha e^{-(C \Gamma(\alpha + 1) \tau)^{\frac{1}{\alpha+2}} \lambda}} \quad (2.41)$$

Um eine Aussage über die Qualität der Formel (2.41) machen zu können, wird sie in den Abbildungen 2.3 und 2.4 mit den numerisch aus (2.20) gewonnenen Daten für $\rho(2500, \lambda)$ mit $\alpha = 1$ und $\alpha = 10$ verglichen ($\tau = 2, C = 1$). Dabei wird deutlich, daß $\rho(\lambda, 2500)$ in dieser Darstellung bereits nicht mehr von der jeweiligen Verteilung $\rho(\lambda)$ zu unterscheiden ist.

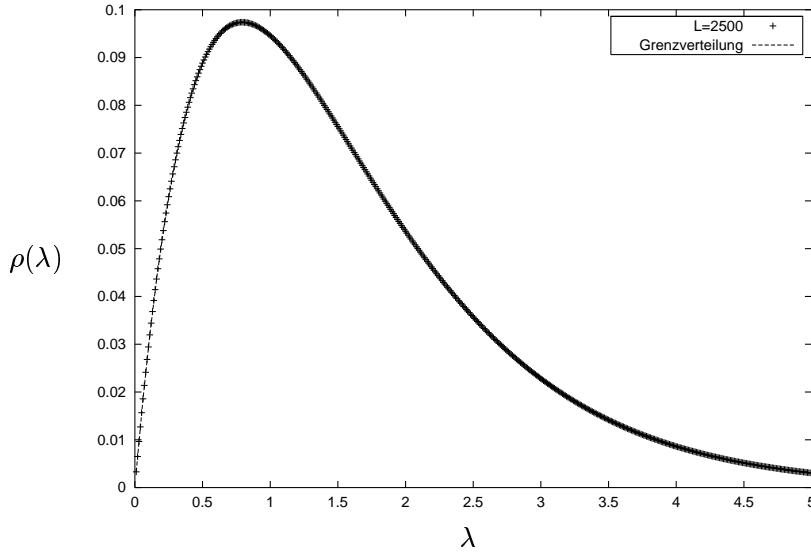


Abbildung 2.3: $\rho(2500, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation sowie Grenzverteilung $\rho(\lambda)$ für $\alpha = 1, \tau = 2, C = 1$

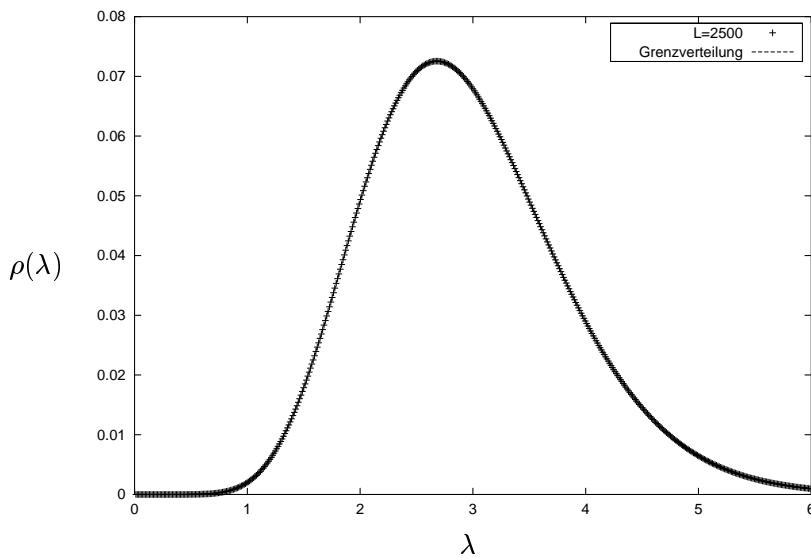


Abbildung 2.4: $\rho(2500, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation sowie Grenzverteilung $\rho(\lambda)$ für $\alpha = 10, \tau = 2, C = 1$

Es ist in diesem Zusammenhang weiterhin interessant, das Konvergenzverhalten, d.h. die Abweichungen der Verteilungen bei unterschiedlichen Werten von L untereinander und zur Grenzverteilung, zu untersuchen. Entsprechend sind die Differenzen der Verteilungen $\rho(L, \lambda)$ für $L=500, 1000, 1500, 2000, 2500$ und $\alpha = 1, 10$ zur jeweiligen Verteilung im thermodynamischen Limes in den Abbildungen 2.5 und 2.6 aufgetragen. Dort wird deutlich, in welcher Form die Annäherung an die Grenzverteilung tatsächlich erfolgt.

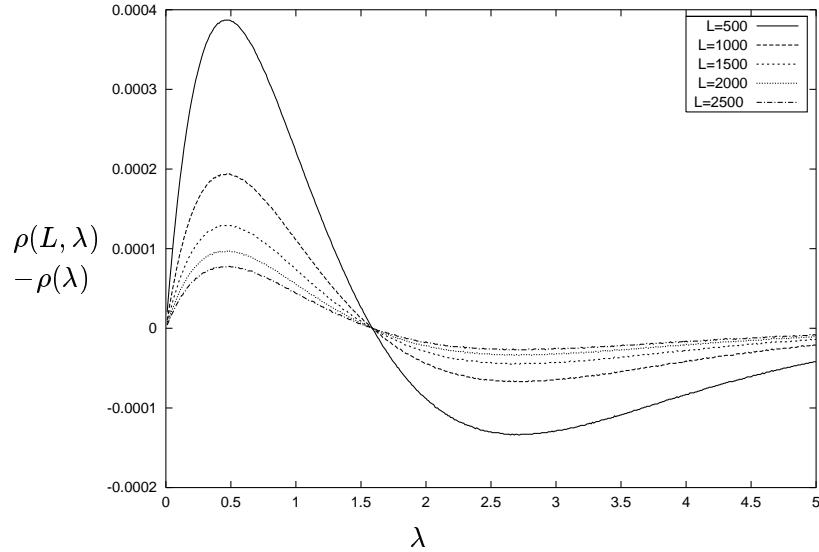


Abbildung 2.5: $\rho(L, \lambda) - \rho(\lambda)$, $L=500, 1000, 1500, 2000, 2500$, $\rho(L, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation, $\rho(\lambda)$ aus Formel (2.41), $\alpha = 1, \tau = 2, C = 1$

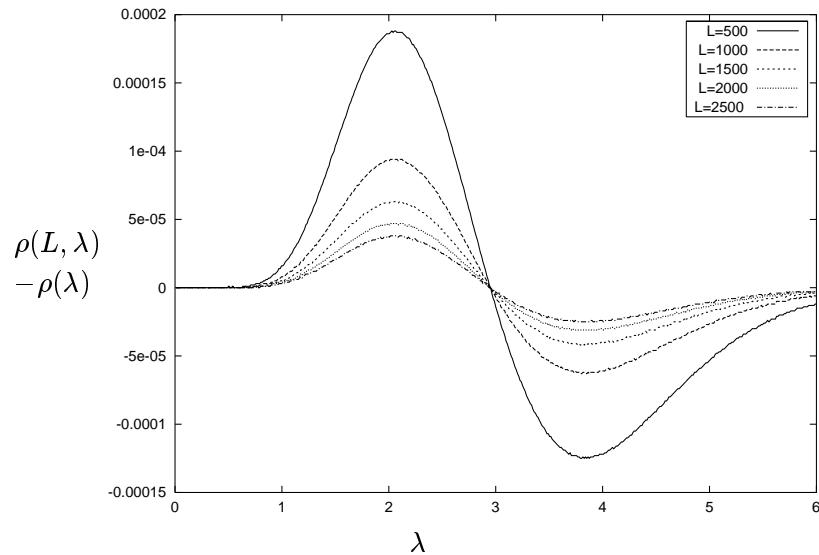


Abbildung 2.6: $\rho(L, \lambda) - \rho(\lambda)$, $L=500, 1000, 1500, 2000, 2500$, $\rho(L, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation, $\rho(\lambda)$ aus Formel (2.41), $\alpha = 10, \tau = 2, C = 1$

Da die Verteilung der Instantonradien in einem beliebig großen Volumen von Interesse ist, kann im folgenden auf die einfache Formel (2.41) für ρ zurückgegriffen werden. Wichtig ist in diesem Zusammenhang zu wissen, daß die Grenzverteilung nach potenzartigem Wachstum bei kleinen Argumenten schließlich für große λ exponentiell verschwindet.

Abschließend soll $\rho(\lambda)$ noch einmal in einer Form dargestellt werden, die auf die

ursprüngliche Variable κ sowie die Raum-Zeit-Dimension ν zurückgeht, um die Formel (2.41) später besser in den allgemeinen Fall beliebiger Dimension einbetten zu können. Mit der Beobachtung

$$\begin{aligned}\alpha &= \kappa - \nu - 1 \\ \alpha + 2 &\stackrel{\nu=1}{=} \kappa = \frac{\kappa}{\nu} = \beta\end{aligned}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}\rho(\lambda) &= \frac{C}{\kappa} \lambda^{\kappa-2} e^{-(C\Gamma(\kappa-1)\tau)^{\frac{1}{\kappa}}\lambda} \\ &\stackrel{\nu=1}{=} \frac{C\nu}{\kappa} \lambda^{\kappa-\nu-1} e^{-(C\Gamma(\frac{\kappa}{\nu}-1)\tau)^{\frac{\nu}{\kappa}}\lambda^\nu}.\end{aligned}\quad (2.42)$$

Kapitel 3

Monte-Carlo-Simulationen

Nachdem bereits ein Eindruck von dem Verhalten eines Instanton-Gases in einer Dimension gewonnen werden konnte, soll dieses nun in beliebiger Dimension mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen ausgeweitet werden. Nach einigen allgemeinen Ausführungen zu dieser Methode wird ein geeigneter Algorithmus zur Behandlung eines großkanonischen Systems abgeleitet. Schließlich geben die ersten Ergebnisse der Simulation den Rahmen vor, in dem sich darauf folgende analytische Näherungen bewegen können.

3.1 Der METROPOLIS-Algorithmus

Der METROPOLIS-Algorithmus stellt einen speziellen Ansatz unter verschiedenen Monte-Carlo-Methoden dar und wurde zuerst von METROPOLIS *et.al.* [19] in den fünfziger Jahren zur Untersuchung des statistischen Verhaltens von Gasen und Flüssigkeiten entwickelt.

Ein zentrales Problem, mit dem man in der statistischen Physik konfrontiert wird, ist die Bestimmung von Mittelwerten in einem hochdimensionalen Konfigurationsraum. Die entscheidende Idee hierbei ist, bei der Erfassung dieses Raumes bevorzugt solche Bereiche zu berücksichtigen, die ein großes statistisches Gewicht tragen, so daß das Problem überhaupt erst behandelbar wird. Durch dieses sogenannte „Importance Sampling“ können erhebliche Fehler durch mangelhafte Beachtung großer Beiträge im Mittelungsprozess vermieden werden, die nur durch unrealisierbar lange Rechenzeiten behoben werden könnten. Die interessierenden Konfigurationen können nun *statisch* entsprechend ihrem statistischen Gewicht generiert werden. Da die zugrundeliegende Verteilung jedoch i.a. nicht bekannt ist, wird sie *dynamisch* als Gleichgewichtsverteilung eines stochastischen Prozesses generiert.

Hier sollen nun die wesentlichen Begriffe eingeführt werden, sowie zentrale Ideen skizziert werden. Umfassendere Literatur zu diesem Thema findet sich unter [20], [21], [22], [23], [24].

Im folgenden werden Markov-Ketten mit einer Übergangsmatrix $W(X, Y)$ betrachtet, die die Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeiteinheit angibt, mit der ein System, das sich im Zustand X befindet, in den Zustand Y wechselt. Dabei gibt $P(X)$ die Wahrscheinlichkeit an, das System im Zustand X anzutreffen. Die Verteilung $P_{t+1}(X)$ im Iterationsschritt $t+1$ wird aus der Verteilung $P_t(X)$ durch die Operation

$$P_{t+1}(X) = \sum_Y W(Y, X) P_t(Y) \quad (3.1)$$

gewonnen. Es sollen nun verschiedene Anforderungen an die Übergangsmatrix gestellt werden:

1. **Normierung:** Es existiert genau eine Nachfolgekonfiguration,

$$\sum_Y W(X, Y) = 1. \quad (3.2)$$

2. **Ergodizität:** Jede Konfiguration kann erreicht werden,

$$\forall X, Y \quad \exists n \geq 1 \quad W^n(X, Y) > 0. \quad (3.3)$$

($W^n(X, Y)$ bezeichne die Matrixelemente der Matrix W^n .)

3. **Stationarität:** Es gibt eine stationäre Verteilung (Gleichgewichtsverteilung) P für die durch $W(X, Y)$ bestimmte Markov-Kette,

$$\sum_X W(X, Y) P(X) = P(Y). \quad (3.4)$$

Die Bedingung für Stationarität leitet sich direkt aus der Master-Gleichung ab, die in differentieller Form die Gestalt

$$\frac{dP(X, t)}{dt} = \sum_Y -W(X, Y) P(X, t) + W(Y, X) P(Y, t) \quad (3.5)$$

hat. Eine hinreichende Bedingung ist durch die „*detailed balance*“ gegeben:

$$\frac{W(Y, X)}{W(X, Y)} = \frac{P(X)}{P(Y)}. \quad (3.6)$$

Es läßt sich zeigen, daß unter diesen Voraussetzungen bei einer beliebigen Startverteilung, d.h. einer Startkonfiguration die nach dieser Verteilung generiert wurde, Konvergenz gegen eine stationäre Grenzverteilung vorliegt. Diese ist dann eindeutig durch P gegeben, d.h.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|P_t - P\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_X |P_t(X) - P(X)| = 0. \quad (3.7)$$

In der Praxis wird die Übergangsmatrix i.a. in zwei Teile zerlegt:

$$\begin{aligned}\omega(X, Y) & \quad \text{Vorschlagswahrscheinlichkeit für den Übergang von } X \text{ nach } Y \\ & \sum_Y \omega(X, Y) = 1\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}a_{XY} & \quad \text{Annahmewahrscheinlichkeit für den entsprechenden Vorschlag} \\ 1 - a_{XY} & \quad \text{Wahrscheinlichkeit für Ablehnung},\end{aligned}$$

und es ergibt sich die Darstellung

$$W(X, Y) = \omega(X, Y)a_{XY} \quad X \neq Y \quad (3.8)$$

$$W(X, X) = \omega(X, X)a_{XX} + \sum_Y \omega(X, Y)(1 - a_{XY}) \quad (3.9)$$

$$= \omega(X, X) + \sum_{Y \neq X} \omega(X, Y)(1 - a_{XY}). \quad (3.10)$$

Nun ist die Bedingung der Normierung damit direkt erfüllt. Die Frage der Ergodizität ist im Kontext des konkreten Problems zu erörtern. Um der Forderung der „detailed balance“ gerecht zu werden, wird a_{XY} im allgemeinen nach einem Vorschlag von METROPOLIS folgendermaßen bestimmt:

$$a_{XY} = \min \left(1, \frac{\omega(Y, X)P(Y)}{\omega(X, Y)P(X)} \right). \quad (3.11)$$

Dies liefert auch einen praktikablen Startpunkt für Monte-Carlo-Verfahren in der Physik, da dort oft das Verhältnis solcher Wahrscheinlichkeiten bekannt ist, während aber die Normierungskonstante, also die Zustandssumme, unbekannt ist. Ob ein vorgeschlagener Schritt im Konfigurationsraum zur Ausführung kommt, wird schließlich konkret durch den Vergleich einer Zufallszahl aus dem Intervall von 0 bis 1 mit dem Quotienten in der obigen Formel (3.11) entschieden.

3.2 Der METROPOLIS-Algorithmus im klassischen großkanonischen Ensemble

Bisher wurde bereits ein großkanonisches Ensemble von Instantonen untersucht, das (mit den üblichen Bezeichnungen) folgender Verteilung gehorcht:

$$P_K(V; \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_K, \lambda_1, \dots, \lambda_K) = \frac{1}{Z(V)} \frac{C^K}{K!} \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \quad (3.12)$$

$$\alpha = \kappa - \nu - 1$$

$$\Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) = \begin{cases} 1 & \star \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\star = \begin{cases} 1. & \|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i\| > \left(\frac{\tau}{v_1}\right)^{\frac{1}{\nu}} (\lambda_j + \lambda_i) \quad \forall i, j \\ 2. & |a_j^\mu| < \frac{1}{2} V^{\frac{1}{\nu}} \quad \mu = 1, \dots, \nu \quad \forall j \\ 3. & 0 < \lambda_j < \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V\right)^{\frac{1}{\nu}} \quad \forall j. \end{cases}$$

$P_K(V; \{\mathbf{a}\}, \{\lambda\})$ ist Wahrscheinlichkeitsdichte auf

$$\sum_{K=0}^{\infty} \left(V \times \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V \right)^{\frac{1}{\nu}} \right)^K.$$

Übergänge zwischen Konfigurationen werden zum einen durch Bewegung in den Koordinaten $\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}$ induziert, wie es aus dem kanonischen Ensemble bekannt ist, zum anderen durch die Erzeugung und Vernichtung von Instantonen bzw. Instantonkoordinaten. Entsprechend den obigen Vorgaben sollen nun zunächst die Vorschlagswahrscheinlichkeiten für den Übergang in eine andere Konfiguration angegeben werden. Besondere Aufmerksamkeit gilt den Prozessen, bei denen die Instantanzahl nicht erhalten ist, da diese aus kanonischen Algorithmen nicht bekannt sind (vgl. [25], [26], [27], [28], [29]).

3.2.1 Vorschlagswahrscheinlichkeiten

Die Bezeichnung der Koordinatenerzeugung bzw. -vernichtung wird hier bewußt gewählt, da Instantonen als ununterscheidbare Objekte aufgefaßt werden, die sich in beliebiger Größe darstellen können. Die Angabe von Koordinaten entspricht einer Platzreservierung für ein Instanton, jedoch kann keine Aussage darüber gemacht werden, *welches* Instanton sich dort befindet. Den bisherigen Konventionen folgend werden also Übergänge zwischen geordneten Koordinatentupeln zu untersuchen sein, wobei die in Kapitel 1.4 eingeführte Kurzschreibweise

$$\{\vec{A}_j\}^K = (\vec{A}_1, \dots, \vec{A}_K) = ((\mathbf{a}_1, \lambda_1), \dots, (\mathbf{a}_K, \lambda_K))$$

benutzt werden soll. Außerdem muß festgelegt werden, welcher Verteilung die neu generierten Koordinaten unterliegen sollen.

- | | |
|----------------------|--|
| $p_{cr}(\mathbf{a})$ | Erzeugungswahrscheinlichkeit für die Raum-Zeit-Koordinaten |
| $p_{cr}(\lambda)$ | Erzeugungswahrscheinlichkeit für die Radiuskoordinate |

I.a. wurde hierbei einfach eine Gleichverteilung im entsprechenden Volumen gewählt:

$$p_{cr}(\mathbf{a}) = \frac{1}{V} \tag{3.13}$$

$$p_{cr}(\lambda) = \frac{2}{\left(\frac{v_1}{\tau} V\right)^{\frac{1}{\nu}}}. \tag{3.14}$$

Nun sollen die Vorschläge zur Instantonbewegung und zur Koordinatenerzeugung und -vernichtung mit gleicher Wahrscheinlichkeit erfolgen, so daß die entsprechenden Verteilungen jeweils einen Faktor $\frac{1}{3}$ enthalten.

Koordinatenerzeugung $K \rightarrow K + 1$

Ausgehend von einem geordneten K -Tupel $\{\vec{A}_j\}^K$ sollen Vorschlagswahrscheinlichkeiten für den Übergang in ein geordnetes $(K + 1)$ -Tupel $\{\vec{A}'_j\}^{K+1}$, das die alten Koordinaten $\{\vec{A}_j\}^K$ enthält, angegeben werden. Das einfachste Vorgehen ist durch das Vorschlagen aller möglichen Zielkonfigurationen mit gleicher Wahrscheinlichkeit gegeben. Unter Berücksichtigung, daß es $(K + 1)$ Möglichkeiten gibt, die Position der neuen Koordinaten im Tupel anzugeben (nicht die Koordinaten selbst!), und noch einmal $K!$ unterschiedliche Anordnungen der bisherigen Koordinaten auftreten können, ergibt sich der folgende Ausdruck für die Vorschlagswahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned} \omega(K; \{\vec{A}_j\}^K, K + 1; \{\vec{A}'_j\}^{K+1}) &= \frac{1}{3} p_{cr}(\mathbf{a}'_j) p_{cr}(\lambda'_j) \frac{1}{(K + 1)!} \times \\ &\sum_{j=1}^{K+1} \sum_{\pi \in S_K} \delta(\vec{A}_{\pi(1)} - \vec{A}'_1) \dots \delta(\vec{A}_{\pi(j-1)} - \vec{A}'_{j-1}) \delta(\vec{A}_{\pi(j)} - \vec{A}'_{j+1}) \dots \delta(\vec{A}_{\pi(K)} - \vec{A}'_{K+1}). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Also mit den kanonischen Verteilungen p_{cr} für die Koordinatengenerierung:

$$\begin{aligned} \omega(K; \{\vec{A}_j\}^K, K + 1; \{\vec{A}'_j\}^{K+1}) &= \frac{1}{3} \frac{1}{(K + 1)!} \frac{2}{V \left(\frac{v_1}{\tau} V \right)^{\frac{1}{\nu}}} \times \\ &\sum_{j=1}^{K+1} \sum_{\pi \in S_K} \delta(\vec{A}_{\pi(1)} - \vec{A}'_1) \dots \delta(\vec{A}_{\pi(j-1)} - \vec{A}'_{j-1}) \delta(\vec{A}_{\pi(j)} - \vec{A}'_{j+1}) \dots \delta(\vec{A}_{\pi(K)} - \vec{A}'_{K+1}). \end{aligned} \quad (3.16)$$

In diesem Zusammenhang ist die Beobachtung wichtig, daß neben den kombinatorischen Faktoren auch Volumenfaktoren in der Vorschlagswahrscheinlichkeit enthalten sind, deren konkrete Form von der jeweiligen Wahl von p_{cr} abhängt. Diese Faktoren werden bei der Koordinatenvernichtung nicht auftreten.

Koordinatenvernichtung $K \rightarrow K - 1$

Analog werden schließlich die Vorschlagswahrscheinlichkeiten für Prozesse, die die Instantanzahl reduzieren, formuliert. Zu betrachten ist ein Übergang aus einem geordneten K -Tupel $\{\vec{A}_j\}^K$ in ein entsprechendes $(K - 1)$ -Tupel $\{\vec{A}'_j\}^{K-1}$, wobei wie oben alle aus einer Ausgangskonfiguration erreichbaren Zustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorgeschlagen werden sollen. Wird berücksichtigt, daß K Möglichkeiten existieren, eine Position zur Vernichtung auszuwählen und daß weiterhin $(K - 1)!$ Anordnungen für die verbleibenden Positionen zur Auswahl stehen, so ergibt sich folgende Verteilung:

$$\begin{aligned} \omega(K; \{\vec{A}_j\}^K, K - 1; \{\vec{A}'_j\}^{K-1}) &= \frac{1}{3} \frac{1}{K!} \times \\ &\sum_{j=1}^K \sum_{\pi \in S_K} \delta(\vec{A}_1 - \vec{A}'_{\pi(1)}) \dots \delta(\vec{A}_{j-1} - \vec{A}'_{\pi(j-1)}) \delta(\vec{A}_{j+1} - \vec{A}'_{\pi(j)}) \dots \delta(\vec{A}_K - \vec{A}'_{\pi(K-1)}). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Offenbar enthält diese Vorschlagsdichte keine Volumenfaktoren. Sofern Annahmewahrscheinlichkeiten aus kanonischen Algorithmen bekannt sind, werden im folgenden Modifikationen an dieser Stelle auffällig sein. Von Bedeutung für die konkrete Realisierung des Algorithmus ist, daß die Instantonwechselwirkung im Gegensatz zum Fall der Koordinatengenerierung unterscheiden kann, an welcher Position die Vernichtung stattgefunden hat.

Koordinatenbewegung

Die Teilchenbewegung soll mit gleicher Wahrscheinlichkeit an beliebiger Position im K -Tupel vorgeschlagen werden. Hierbei muß darauf geachtet werden, daß der Übergang von den aktuellen zu den neuen Koordinaten mit gleicher Wahrscheinlichkeit angeregt wird wie der umgekehrte Vorgang, um diesen Schritt nicht mehr zur Erfüllung der „detailed balance“ heranziehen zu müssen. So wählt man i.a. als die einfachste Variante gleichverteilte Koordinatenvorschläge in einem Volumen $[-\delta_a, \delta_a]^\nu \times [-\delta_\lambda, \delta_\lambda]$ symmetrisch um die Ausgangskoordinaten.

3.2.2 Annahmewahrscheinlichkeiten

An dieser Stelle wird die von METROPOLIS vorgeschlagene Formel für die Annahmewahrscheinlichkeiten hinzugezogen, die die Bedingung der „detailed balance“ unter den bisherigen Voraussetzungen in jedem Fall erfüllt:

$$a_{XY} = \min \left(1, \frac{\omega(Y, X)P(Y)}{\omega(X, Y)P(X)} \right). \quad (3.18)$$

Mit den Überlegungen des obigen Abschnitts können die Annahmewahrscheinlichkeiten a_{XY} für die einzelnen Fälle direkt angegeben werden, wobei X und Y als Kurzschreibweisen für Konfigurationen der Form $\{\vec{A}_j\}^K$ aufzufassen sind. Der Index K an der Verteilung P wird nur aus Gründen der Übersichtlichkeit im folgenden unterdrückt. Ins Gedächtnis seien auch noch einmal die Bedingungen gerufen, die i.a. mit „ \star “ zusammengefaßt werden:

$$\star = \begin{cases} 1. & \|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i\| > \left(\frac{\tau}{v_1}\right)^{\frac{1}{\nu}} (\lambda_j + \lambda_i) \quad \forall i, j \\ 2. & |a_j^\mu| < \frac{1}{2} V^{\frac{1}{\nu}} \quad \mu = 1, \dots, \nu \quad \forall j \\ 3. & 0 < \lambda_j < \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V\right)^{\frac{1}{\nu}} \quad \forall j. \end{cases}$$

Koordinatenerzeugung $K \rightarrow K + 1$

$$\begin{aligned} a_{XY} &= \min \left(1, \frac{1}{p_{cr}(\mathbf{a}) p_{cr}(\lambda)} \frac{P(Y)}{P(X)} \right) \\ &= \min \left(1, \frac{V(\frac{v_1}{\tau} V)^{\frac{1}{\nu}}}{2} \frac{P(Y)}{P(X)} \right) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Im Algorithmus wird dies durch den Vergleich mit einer Zufallszahl x aus $]0,1[$ realisiert, und mit der Konvention, die neuen Koordinaten als gestrichen darzustellen, folgt

$$X \rightarrow \begin{cases} Y, & \frac{CV(\frac{v_1}{\tau} V)^{\frac{1}{\nu}}}{2(K+1)} \lambda'^{\alpha} \geq x \text{ und } \star \text{ erfüllt} \\ X, & \frac{CV(\frac{v_1}{\tau} V)^{\frac{1}{\nu}}}{2(K+1)} \lambda'^{\alpha} < x \text{ oder } \star \text{ nicht erfüllt.} \end{cases}$$

Insbesondere wird deutlich, wie mit zunehmender Teilchenzahldichte die Koordinatengenerierung unwahrscheinlicher wird.

Koordinatenvernichtung $K \rightarrow K - 1$

$$\begin{aligned} a_{XY} &= \min \left(1, p_{cr}(\mathbf{a}) p_{cr}(\lambda) \frac{P(Y)}{P(X)} \right) \\ &= \min \left(1, \frac{2}{V(\frac{v_1}{\tau} V)^{\frac{1}{\nu}}} \frac{P(Y)}{P(X)} \right) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Für Teilchenvernichtung an Position j ergibt sich analog

$$X \rightarrow \begin{cases} Y, & \frac{2K}{CV(\frac{v_1}{\tau} V)^{\frac{1}{\nu}}} \frac{1}{\lambda_j^{\alpha}} \geq x \\ X, & \frac{2K}{CV(\frac{v_1}{\tau} V)^{\frac{1}{\nu}}} \frac{1}{\lambda_j^{\alpha}} < x. \end{cases}$$

Insbesondere ist „ \star “ in jedem Fall erfüllt.

Koordinatenbewegung

Da die Vorschlagswahrscheinlichkeiten für die Koordinatenbewegung symmetrisch gewählt wurden, d.h.

$$\omega(X, Y) = \omega(Y, X), \quad (3.21)$$

vereinfacht sich der Ausdruck für die Annahmeverteilung zu

$$a_{XY} = \min \left(1, \frac{P(Y)}{P(X)} \right) \quad (3.22)$$

und die Bewegung an der Stelle j unterliegt den Bedingungen

$$X \rightarrow \begin{cases} Y, & \left(\frac{\lambda'_j}{\lambda_j} \right)^{\alpha} \geq x \text{ und } \star \text{ erfüllt} \\ X, & \left(\frac{\lambda'_j}{\lambda_j} \right)^{\alpha} < x \text{ oder } \star \text{ nicht erfüllt.} \end{cases}$$

3.3 Umsetzung des Algorithmus

Bei der konkreten Umsetzung des Algorithmus wird ausgenutzt, daß die Ordnung im Tupel nicht von der Instantonwechselwirkung erkannt wird; d.h. es müssen nicht Übergänge in alle möglichen geordneten Tupel generiert werden. Vielmehr genügt es, beim Übergang aus einer Konfiguration einen Repräsentanten aus jeder der von der Wechselwirkung unterschiedenen Klassen von Zielkonfigurationen zu wählen, der bzgl. der Ausgangskonfiguration eindeutig ist. Wichtig ist dabei, daß mit der Vorschrift, nach der solch ein Repräsentant ausgewählt wird, jede Klasse erreicht werden kann, die auch durch direkten Übergang zwischen den Konfigurationen möglich wäre. In der Simulation wird dieses Konzept durch die Klasse config umgesetzt, die die aktuelle Konfiguration enthält und darüber hinaus die Methoden create, destroy und move bereitstellt, die in jedem Simulationsschritt jeweils mit gleicher Wahrscheinlichkeit aufgerufen werden.

- **create**

Die Methode create schlägt die Erzeugung eines Instantons mit zufällig im vorliegenden Volumen generierten Koordinaten an fester Stelle im entsprechenden K -Tupel von Instantonen vor. Die Position, an der die Instantonkoordinaten erzeugt werden, ist von der Wechselwirkung nicht erkennbar. Also ist die Zielklasse eindeutig, so daß diese Repräsentantenwahl gerechtfertigt ist. In einem nächsten Schritt wird dann die Annahme des Vorschlags nach den bisher erarbeiteten Kriterien überprüft und entsprechend verfahren.

- **destroy**

Während die Koordinatenerzeugung an fester Stelle im Tupel erfolgt, schlägt die Methode destroy die Vernichtung von Instantonkoordinaten an zufälliger Position im Tupel vor. Dies ist von Bedeutung, da die Wechselwirkung unterscheiden kann, an welcher Position die Methode destroy angreift, d.h. in diesem Fall gibt es gerade so viele von der Wechselwirkung unterschiedene Endklassen wie Instantonen in der Ausgangskonfiguration vorliegen. Als Repräsentanten in den jeweiligen Klassen wurden schließlich die geordneten Tupel gewählt, die die alte Durchnumerierung unter Auslassung der entstandenen Lücke übernehmen. Abschließend wird die Annahme der Koordinatenvernichtung entsprechend den obigen Vorgaben von der Methode destroy geprüft und ggf. ausgeführt.

- **move**

Analog schlägt die Methode move eine Koordinatenbewegung an zufälliger Stelle im Tupel vor und entscheidet ebenfalls über die Ausführung der Bewegung im aktuellen Simulationsschritt. Hierbei werden periodische Randbedingungen vorgegeben.

Die Verteilung der Instantonradien wird durch die Aufnahme eines Histogramms über die einzelnen Simulationsschritte ermittelt. Hierbei wurde als Startkonfiguration der Simulation ein leeres Volumen gewählt, wobei die Messung an einem Zeitpunkt beginnt, an dem die Instantanzahl in eine Sättigung übergeht.

3.4 Erste Ergebnisse der Simulationen

In den Monte-Carlo-Simulationen wurden, sofern nicht anders angegeben, C und τ folgendermaßen gewählt:

$$\tau = v_1 = \frac{\pi^{\frac{\nu}{2}}}{\Gamma(\frac{\nu}{2} + 1)}, \quad C = 1.$$

Die Volumina wurden jeweils so eingestellt, daß der thermodynamische Limes zufriedenstellend erreicht ist.

3.4.1 Der eindimensionale Fall

Zunächst ist es sinnvoll, den analytischen Ausdruck für die Verteilung der Instantonradien, der für den eindimensionalen Fall im thermodynamischen Limes bekannt ist, mit den Ergebnissen der Simulation zu vergleichen.

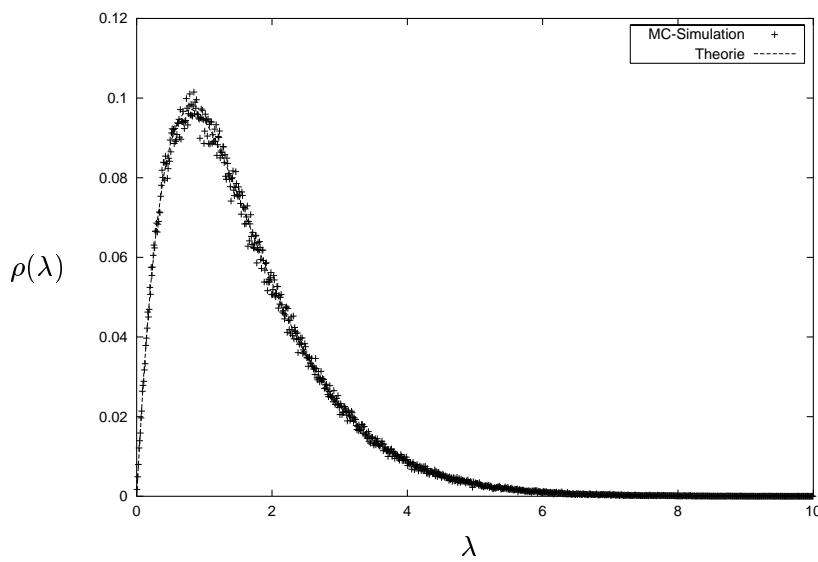


Abbildung 3.1: $\rho(\lambda)$ für $\alpha = 1, \nu = 1$ aus der theoretischen Betrachtung des Kapitels 2 im Vergleich mit den Ergebnissen der entsprechenden Monte-Carlo-Simulation mit $V = L = 2000$

In Abbildung 3.1 sind nun sowohl die theoretische Kurve, entsprechend

$$\rho(\lambda) = \frac{C}{\alpha + 2} \lambda^\alpha e^{-(C\Gamma(\alpha+1)\tau)^{\frac{1}{\alpha+2}} \lambda}, \quad (3.23)$$

als auch das aus der Simulation erzeugte Histogramm dargestellt. Sie weisen eine sehr gute Übereinstimmung auf.

3.4.2 Der mehrdimensionale Fall

Zu erwarten ist auch im Fall eines mehrdimensionalen Instanton-Gases aufgrund zum eindimensionalen Fall analoger Überlegungen, daß die Verteilung der Radien für kleine Werte potenzartig verschwindet derart, daß:

$$\rho(\lambda) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \text{const. } \lambda^\alpha \quad (3.24)$$

$$\alpha = \kappa - \nu - 1 = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\ln(\rho(\lambda))}{\ln(\lambda)}. \quad (3.25)$$

Hierbei bleibt eine tiefere Rechtfertigung dieser Aussage dem folgenden Kapitel überlassen, denn zunächst soll der Blick auf die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen gerichtet werden. In Abbildung 3.2 sind die Verteilungen der Instantonradien im thermodynamischen Limes in zwei, drei und vier Raum-Zeit-Dimensionen aufgetragen. Für kleine Werte von λ wird entsprechend der Parameterwahl $\alpha = 1$ ein lineares Anwachsen der Kurven deutlich.

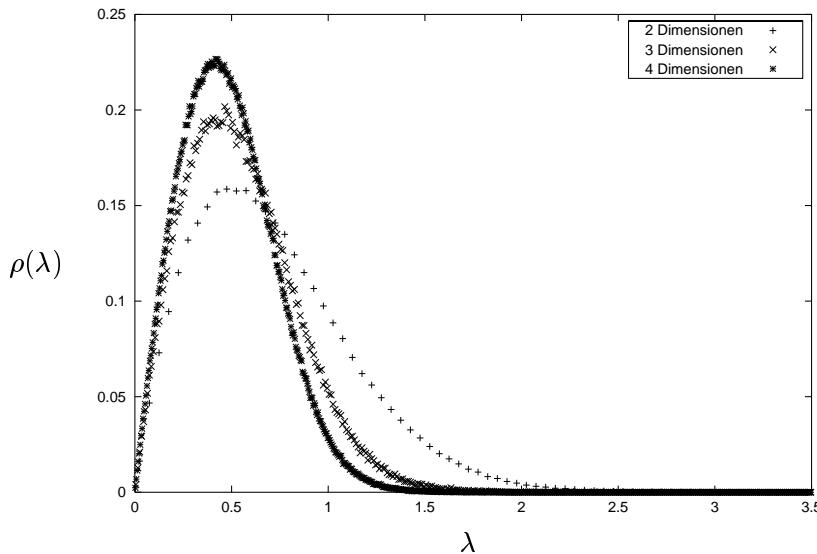


Abbildung 3.2: $\rho(V, \lambda)$ für $\alpha = 1, \nu = 2, 3, 4, V = 100^2, 20^3, 10^4$ aus Monte-Carlo-Simulationen

Ebenso interessant ist die Frage nach dem Verschwinden der Dichtefunktion ρ für große Instantonradien. Hierzu bietet sich eine logarithmische Auftragung an.

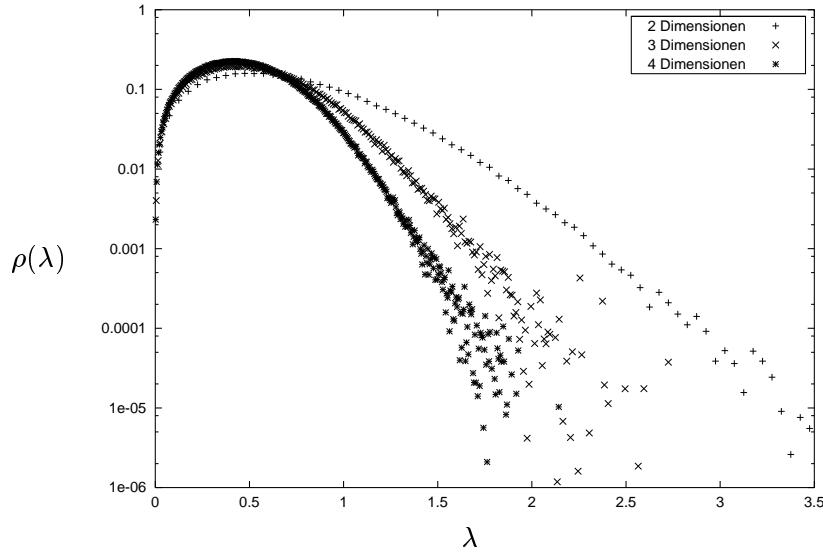


Abbildung 3.3: $\rho(V, \lambda)$ für $\alpha = 1, \nu = 2, 3, 4, V = 100^2, 20^3, 10^4$ aus Monte-Carlo-Simulationen, logarithmische Auftragung

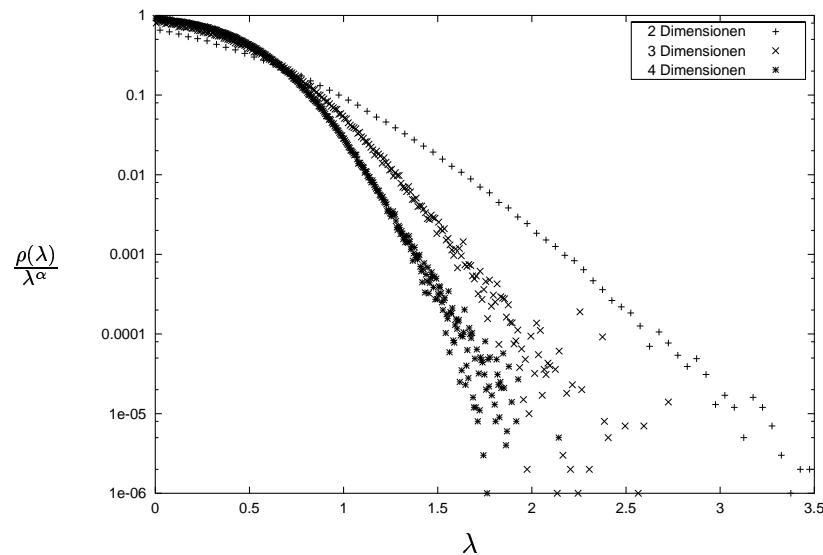


Abbildung 3.4: $\frac{\rho(V, \lambda)}{\lambda^\alpha}$ für $\alpha = 1, \nu = 2, 3, 4, V = 100^2, 20^3, 10^4$ aus Monte-Carlo-Simulationen, logarithmische Auftragung

In Abbildung 3.3 ist zu erkennen, daß das Verhalten der Verteilung bei großen Argumenten verträglich ist mit einem Ansatz der Form

$$\rho(\lambda) \stackrel{\lambda \rightarrow \infty}{\sim} \exp(-f_{Pol}(\lambda)), \quad (3.26)$$

wobei $f_{Pol}(\lambda)$ ein Polynom in λ bezeichne. Es wird offensichtlich, daß die Wahrscheinlichkeit für große Instantonradien mit zunehmender Dimension deutlich abnimmt.

Schließlich ist zu vermuten, daß ρ wie im eindimensionalen Fall die Gestalt

$$\rho(\lambda) = \text{const. } \lambda^\alpha \exp(-f_{Pol}(\lambda)) \quad (3.27)$$

hat. Betrachtet wird so auch die Funktion

$$F(\lambda) = \frac{\rho(\lambda)}{\lambda^\alpha}, \quad (3.28)$$

die in Abbildung 3.4 in logarithmischer Skala aufgetragen ist. Es ist zu erwarten, daß der Grad des Polynoms, das den Abfall der Verteilung bestimmt, mit der Raum-Zeit-Dimension zunimmt.

Kapitel 4

Das allgemeine Instanton-Gas

Im vorangegangenen Kapitel wurde mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen untersucht, welcher Verteilung die Radien von Instantonen in einem Gas von harten Kugeln unterliegen. Wie im eindimensionalen Fall soll nun noch einmal das Augenmerk auf einen analytischen Zugang gerichtet werden, um den Interpretationsspielraum einzuschränken, den die numerischen Ergebnisse lassen. Zur Abschätzung der Qualität der anstehenden Näherungen sollen aber auch die Resultate der Monte-Carlo-Simulationen hinzugezogen werden. Abschließend werden diese auf dem Hintergrund der analytischen Näherungen diskutiert.

Zunächst wird es darum gehen, die Randverteilung $\rho(V, \lambda)$ der Wahrscheinlichkeitsdichte $P_K(V; \{\mathbf{a}\}, \{\lambda\})$ auf

$$\sum_{K=0}^{\infty} \left(V \times \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V \right)^{\frac{1}{\nu}} \right)^K$$

mit

$$P_K(V; \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_K, \lambda_1, \dots, \lambda_K) = \frac{1}{Z} \frac{C^K}{K!} \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \quad (4.1)$$

$$0 \leq \alpha = \kappa - \nu - 1$$

$$\Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) = \begin{cases} 1 & \star \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\star = \begin{cases} 1. & \|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i\| > \left(\frac{\tau}{v_1} \right)^{\frac{1}{\nu}} (\lambda_j + \lambda_i) \quad \forall i, j \\ 2. & |a_j^\mu| < \frac{1}{2} V^{\frac{1}{\nu}} \quad \mu = 1, \dots, \nu \quad \forall j \\ 3. & 0 < \lambda_j < \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V \right)^{\frac{1}{\nu}} \quad \forall j \end{cases}$$

zu bestimmen. Die Verteilung der Radien ist damit gegeben durch (vgl. Abschnitt 1.4, $\lambda = \lambda_K$):

$$\rho(V, \lambda) = \frac{1}{Z(V)V} \sum_{K=1}^{\infty} K Z_K^{red}(V, \lambda) \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} Z(V) &= \sum_{K=0}^{\infty} Z_K(V) \quad Z_0(V) = 1 \\ Z_K(V) &= \frac{C^K}{K!} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=1}^K d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \\ Z_K^{red}(V, \lambda) &= \frac{C^K}{K!} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=1}^{K-1} d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}). \end{aligned}$$

Wie im eindimensionalen Fall besteht zunächst die Aufgabe darin, die Raum-Zeit- sowie Radius-Integrationen im kanonischen System, d.h. bei fester Instantanzahl K , auszuführen.

4.1 Integrationen im kanonischen Ensemble

Um die interessierenden Integrale handhaben zu können, wird zunächst eine Entkopplung der beiden Auswertungsschritte angestrebt, die durch die Radius- und Positionsintegration gegeben sind [14]. Dazu kann die kanonische Zustandssumme $Z_K(V)$ in der Form

$$Z_K(V) = \frac{C^K}{K!} \int_0^{\bar{V}} dv \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=1}^K d\lambda_j \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \delta(v - \tau \sum_j \lambda_j^\nu) \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} v &= \tau \sum_j \lambda_j^\nu \leq \bar{V} && \text{gesamtes effektives Volumen der Instantonen} \\ \bar{V} & && \text{für die Instantonen erreichbares Volumen, } \bar{V} \leq V \end{aligned}$$

geschrieben werden. Im eindimensionalen Fall ist natürlich $\bar{V} = V$, d.h. die Instantonen können den Raum vollständig ausfüllen, wohingegen dies bei Kugelpackungen in höheren Dimensionen nicht mehr der Fall ist. Die gewünschte Entkopplung der Integrationen wird schließlich erlangt mit der Beobachtung, daß

$$\delta(v - \tau \sum_j \lambda_j^\nu) \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha$$

für große K , d.h. im thermodynamischen Limes, ein ausgeprägtes Maximum bei

$$\lambda_j = \left(\frac{v}{K\tau} \right)^{\frac{1}{\nu}} = \lambda_0 \quad j \in \{1, \dots, K\} \quad (4.4)$$

besitzt, so daß eine Sattelpunktsnäherung zu guten Ergebnissen führen sollte. Nun wird das Produkt in den obigen Zustandssummen als Exponentialfunktion dargestellt, deren Exponent um $\{\lambda_0\}^K$ bis zur Ordnung δ^2 entwickelt wird. Auf diese Weise werden Gaußsche Integrale gewonnen

$$Z_K(V) \approx \frac{C^K}{K!} \int_0^{\bar{V}} dv \lambda_0^{\alpha K} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=1}^K d\delta_j e^{-\frac{\alpha}{2\lambda_0^2} \sum_{j=1}^K \delta_j^2} \times \\ \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \delta(v - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j^\nu) \quad (4.5)$$

$$\delta_j = \lambda_j - \lambda_0.$$

Bei der Auswertung von $Z_K^{red}(V, \lambda)$ wird analog vorgegangen. Da ein Probeinstanton mit beliebigem Radius λ auftreten darf, steht den übrigen Instantonen nur noch ein reduziertes Volumen

$$v^{red} = v - \tau \lambda^\nu \quad (4.6)$$

zur Verfügung, so daß die Gaußsche Entwicklung nun um den Punkt

$$\lambda_j = \left(\frac{v^{red}}{(K-1)\tau} \right)^{\frac{1}{\nu}} = \left(\frac{v - \tau \lambda^\nu}{(K-1)\tau} \right)^{\frac{1}{\nu}} = \lambda_0^{red} \quad j \in \{1, \dots, K-1\} \quad (4.7)$$

erfolgt und mit

$$\delta(v - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j^\nu) = \delta(v^{red} - \tau \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j^\nu), \quad \lambda = \lambda_K$$

ergibt sich

$$Z_K^{red}(V, \lambda) \approx \frac{C^K}{K!} \lambda^\alpha \int_0^{\bar{V}} dv \lambda_0^{red \alpha(K-1)} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \prod_{j=1}^{K-1} d\delta_j e^{-\frac{\alpha}{2\lambda_0^{red 2}} \sum_{j=1}^{K-1} \delta_j^2} \times \\ \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \delta(v^{red} - \tau \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j^\nu) \quad (4.8)$$

$$\delta_j = \lambda_j - \lambda_0^{red}.$$

Während also das Instanton, dessen Radius bestimmt werden soll, diesen beliebig im vorgegebenen Volumen v annehmen kann, stellen die übrigen Instantonen ihren Radius derart ein, daß sie das verbleibende Volumen $v - \tau \lambda^\nu$ durch annähernd gleichgroße Kugeln auffüllen. Die Radiusverteilung im großkanonischen Ensemble entsteht nun in diesem Bild dadurch, daß die Konfigurationen mit „unpassendem“ Radius des Testinstantons dort unterdrückt sind.

Ausgehend von (4.5) und (4.8) werden die folgenden Rechenschritte durchzuführen sein:

1. λ -Integration

Die Integration über die Instantonradien wird, wie oben skizziert, auf die Lösung von Gaußschen Integralen zurückgeführt.

2. \mathbf{a} -Integration

Bei der Integration über die Instanton-Positionen kann nur auf grobe Abschätzungen zurückgegriffen werden. Hierbei wird insbesondere von einem Gas aus harten Kugeln mit Radius λ_0 ausgegangen. Die Varianz λ_0 in der obigen Gaußschen Näherung muß dabei klein ist.

3. v -Integration

In einem letzten Schritt wird die Integration über das gesamte effektive Volumen v der Instantonen ausgeführt. An dieser Stelle ist noch einmal zu bemerken, daß die obere Integrationsgrenze durch das für die Instantonen erreichbare Volumen \bar{V} und nicht durch das Systemvolumen V gegeben ist.

Um die Parallelen zu den Rechnungen im eindimensionalen Fall deutlicher zu machen, wird nun zunächst das Integral über die Instantonpositionen behandelt.

4.1.1 Die Integration über die Instantonpositionen

Ein exakter analytischer Ausdruck für

$$\begin{aligned} \bar{I}_K(V) &= \frac{1}{K!} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_j\}) \\ &\approx \frac{1}{K!} \int \prod_{j=1}^K d\mathbf{a}_j \Theta(\{\mathbf{a}_j\}, \{\lambda_0\}) \end{aligned} \quad (4.9)$$

ist im Vergleich zum eindimensionalen Fall nicht allgemein zugänglich. Jedoch ist das dort erhaltene Ergebnis für verdünnte Gase eine gute Näherung [14], [30]:

$$\begin{aligned} \bar{I}_K(V) &\approx \frac{1}{K!} (V - v)^K \\ v &= K\tau\lambda_0^\nu. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Diese Abschätzung geht von der Möglichkeit vollständiger Raumausfüllung aus ($\bar{V} = V$), die bei Kugelpackungen für $\nu > 1$ natürlich nicht gegeben ist, so daß Korrekturen wünschenswert sind. In systematischer Weise wird dies z.B. im Rahmen der Virialentwicklung bei der Herleitung der Zustandsgleichung des van-der-Waals-Gases betrieben. Zu demselben Ergebnis führt auch das folgende geometrische Argument [31]:

1. v_{eff} sei das Volumen, das für ein Instanton unzugänglich ist.

2. Beim Zusammentreffen zweier Instantonen gibt es ein Volumen, das dem einen Instanton wegen der Anwesenheit des anderen unzugänglich ist. Dies ist eine Kugel vom Radius $2\lambda_0$. Schließlich gibt es

$$\frac{1}{2}K(K-1) \approx \frac{1}{2}K^2$$

solcher Paare, d.h. für das gesamte unzugängliche Volumen folgt

$$\frac{1}{2}K^2\tau(2\lambda_0)^\nu = 2^{\nu-1}K^2\tau\lambda_0^\nu.$$

3. Aus Gründen der Selbstkonsistenz ergibt sich aus den Punkten eins und zwei

$$Kv_{eff} = 2^{\nu-1}K^2\tau\lambda_0^\nu.$$

Also:

$$v_{eff} = 2^{\nu-1}K\tau\lambda_0^\nu. \quad (4.11)$$

Dies liefert eine weitere Abschätzung für $\bar{I}_K(V)$

$$\begin{aligned} \bar{I}_K(V) &\approx \frac{1}{K!}(V - v_{eff})^K \\ &\approx \frac{1}{K!}(V - 2^{\nu-1}K\tau\lambda_0^\nu)^K \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$= \frac{1}{K!}(V - 2^{\nu-1}v)^K \quad (4.13)$$

und damit für das erreichbare Volumen

$$\bar{V} \approx 2^{1-\nu}V. \quad (4.14)$$

Da in dieser Näherung nur die Paarwechselwirkungen berücksichtigt werden, führt dies zu einer Unterschätzung des für die Instantonen erreichbaren Volumens. Für $\nu = 3$ folgt hier z.B. eine maximale Raumausfüllung von nur 25%. Mit dichtesten Kugelpackungen können in diesem Fall jedoch Raumausfüllungen von bis zu 74% erreicht werden [32]. Es wäre also naheliegend, die Ergebnisse durch die Berücksichtigung höherer n-Instanton-Wechselwirkungen zu verbessern. Dies führt jedoch sowohl bei der Wahl eines Ansatzes über geometrische Überlegungen, wie oben hinzugezogen, als auch bei der Fortführung der Virialentwicklung zu Ausdrücken, die in den folgenden Rechnungen nicht weiterführen bzw. gar nicht erst anschaulich interpretiert werden können [16], [33].

Immerhin bleibt festzuhalten, daß das Integral über die Instantonpositionen in der folgenden Form genähert werden kann

$$\bar{I}_K(V) \approx \frac{1}{K!}(V - v_{eff})^K \quad (4.15)$$

$$v_{eff} = b(\nu)v \quad (4.16)$$

$$\bar{V} = b(\nu)^{-1}V, \quad (4.17)$$

wobei $b(\nu)$ ein Maß dafür ist, inwieweit die Kugeln das vorgegebene Volumen V auszufüllen vermögen. Betrachtet man die konkreten Ansätze, so wird im ersten Fall $b(\nu) = 1$ gewählt, wohingegen im zweiten Fall $b(\nu) = 2^{\nu-1}$ ist. Dies führt sowohl zu einer Überschätzung als auch zu einer Unterschätzung des erreichbaren Volumens \bar{V} . Eine einfache Verbesserung sollte schon durch die Betrachtung geeigneter Mittelwerte für $b(\nu)$ erzielt werden. Eine mögliche Wahl stellt das geometrische Mittel dar:

$$b_g(\nu) = 2^{\frac{\nu-1}{2}}. \quad (4.18)$$

Im weiteren soll jedoch $b(\nu)$ als Parameter mitgeführt werden, um später ausführlicher diskutiert bzw. an die Daten aus den Monte-Carlo-Simulationen angepaßt zu werden.

4.1.2 Die Integration über die Instantonradien

Bei der Auswertung des ersten der beiden Integrale

$$I'_K(V) = \int \prod_{j=1}^K d\delta_j e^{-\frac{\alpha}{2\lambda_0^2} \sum_{j=1}^K \delta_j^2} \delta(v - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j^\nu) \quad (4.19)$$

$$I'^{red}_K(V) = \int \prod_{j=1}^{K-1} d\delta_j e^{-\frac{\alpha}{2\lambda_0^{red2}} \sum_{j=1}^{K-1} \delta_j^2} \delta(v^{red} - \tau \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j^\nu) \quad (4.20)$$

wird unter Ausnutzung von

$$\begin{aligned} \delta(v - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j^\nu) &\approx \delta(-\tau \sum_{j=1}^K \nu \lambda_0^{\nu-1} \delta_j) \\ &= \frac{\lambda_0^{1-\nu}}{\nu \tau} \delta(\sum_{j=1}^K \delta_j) \\ &= \frac{\lambda_0^{1-\nu}}{2\pi\nu\tau} \int dq e^{iq \sum_{j=1}^K \delta_j} \end{aligned} \quad (4.21)$$

berechnet

$$\begin{aligned} I'_K(V) &= \frac{\lambda_0^{1-\nu}}{2\pi\nu\tau} \int dq \int \prod_{j=1}^K d\delta_j e^{\sum_{j=1}^K -\frac{\alpha}{2\lambda_0^2} \delta_j^2 + iq\delta_j} \\ &= \frac{\lambda_0^{K+1-\nu}}{2\pi\nu\tau} \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{K}{2}} \int dq e^{-\frac{K\lambda_0^2}{2\alpha} q^2} \\ &= \frac{1}{\nu\tau} \frac{1}{\sqrt{K}} \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{K-1}{2}} \lambda_0^{K-\nu} \\ &= \frac{1}{\nu\tau} \frac{1}{\sqrt{K}} \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{\frac{K-1}{2}} \left(\frac{v}{K\tau}\right)^{\frac{K}{\nu}-1}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Analog wird auch der Beitrag zur Randverteilung bestimmt

$$I_K^{red}(V) = \frac{1}{\nu\tau} \frac{1}{\sqrt{K-1}} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-2}{2}} \left(\frac{v^{red}}{(K-1)\tau} \right)^{\frac{K-1}{\nu}-1} \quad (4.23)$$

$$= \frac{1}{\nu\tau} \frac{1}{\sqrt{K-1}} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-2}{2}} \left(\frac{v - \tau\lambda^\nu}{(K-1)\tau} \right)^{\frac{K-1}{\nu}-1}. \quad (4.24)$$

4.1.3 Integration über das Gesamtvolumen v

Mit den Ergebnissen der vorangehenden Abschnitte und mit

$$\beta = \frac{\kappa}{\nu} > 1 \quad (4.25)$$

stellt sich $Z_K(V)$ dar als

$$Z_K(V) \approx \frac{1}{\nu\tau} \frac{C^K}{K!} \frac{1}{\sqrt{K}} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-1}{2}} \int_0^{b(\nu)^{-1}V} dv (V - b(\nu)v)^K \left(\frac{v}{K\tau} \right)^{(\beta-1)K-1}. \quad (4.26)$$

Weitere Ersetzungen

$$\begin{aligned} v' &= \frac{b(\nu)}{V} v \\ \Rightarrow \quad dv &= \frac{V}{b(\nu)} dv' \end{aligned} \quad (4.27)$$

führen zu dem Ausdruck

$$\begin{aligned} Z_K(V) &\approx \frac{1}{\nu\tau} \frac{C^K}{K!} \frac{1}{\sqrt{K}} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-1}{2}} \frac{V}{b(\nu)} V^K \left(\frac{V}{K\tau b(\nu)} \right)^{(\beta-1)K-1} \int_0^1 dv' (1-v')^K v'^{(\beta-1)K-1} \\ &= \frac{1}{\nu} \frac{C^K}{K!} \sqrt{K} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-1}{2}} \left(\frac{V^\beta}{(K\tau b(\nu))^{\beta-1}} \right)^K \frac{\Gamma(K+1)\Gamma((\beta-1)K)}{\Gamma(\beta K+1)} \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{\sqrt{K}}{\nu} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \frac{C}{(K\tau b(\nu))^{\beta-1}} \right)^K \frac{\Gamma((\beta-1)K)}{\Gamma(\beta K+1)} V^{\beta K}, \end{aligned} \quad (4.28)$$

der durch partielle Integration oder mit Hilfe von (2.11) ausgewertet wird. Zur Bestimmung der Radiusverteilung ist auch das Integral

$$Z_K^{red}(V, \lambda) \approx \frac{\lambda^\alpha C^K}{\nu\tau K!} \frac{1}{\sqrt{K-1}} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-2}{2}} \int_{\tau\lambda^\nu}^{b(\nu)^{-1}V} dv (V - b(\nu)v)^K \left(\frac{v - \tau\lambda^\nu}{(K-1)\tau} \right)^{(\beta-1)(K-1)-1} \quad (4.29)$$

zu betrachten, wobei in der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Näherung zu beachten ist, daß die untere Integrationsgrenze durch $v \geq \tau\lambda^\nu$ festgesetzt ist.

Mit den Substitutionen

$$\tilde{V} = V - b(\nu)\tau\lambda^\nu \quad (4.30)$$

$$v' = \frac{b(\nu)}{\tilde{V}} v^{red} = \frac{b(\nu)}{V - b(\nu)\tau\lambda^\nu} (v - \tau\lambda^\nu) \quad (4.31)$$

$$\Rightarrow dv = \frac{\tilde{V}}{b(\nu)} dv' \quad (4.32)$$

wird nachgerechnet

$$\begin{aligned} Z_K^{red}(V, \lambda) &\approx \frac{\lambda^\alpha C^K}{\nu\tau K!} \frac{1}{\sqrt{K-1}} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-2}{2}} \frac{\tilde{V}}{b(\nu)} \tilde{V}^K \left(\frac{\tilde{V}}{(K-1)\tau b(\nu)} \right)^{(\beta-1)(K-1)-1} \times \\ &\quad \int_0^1 dv' (1-v')^K v'^{(\beta-1)(K-1)-1} \\ &= \frac{\tilde{V}\lambda^\alpha C^K}{\nu K!} \sqrt{K-1} \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{K-2}{2}} \left(\frac{\tilde{V}^\beta}{((K-1)\tau b(\nu))^{\beta-1}} \right)^{K-1} \times \\ &\quad \frac{\Gamma(K+1)\Gamma((\beta-1)(K-1))}{\Gamma(\beta(K-1)+2)} \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{\sqrt{K-1}C\lambda^\alpha}{\nu} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \frac{C}{((K-1)\tau b(\nu))^{\beta-1}} \right)^{K-1} \times \\ &\quad \frac{\Gamma((\beta-1)(K-1))}{\Gamma(\beta(K-1)+2)} \tilde{V}^{\beta(K-1)+1}. \quad (4.33) \end{aligned}$$

\tilde{V} entspricht gerade der Größe \tilde{L} in der eindimensionalen Behandlung. Da für $\nu = 1$ $\beta = \alpha + 2$ ist, sind gewisse Parallelen zu den exakten Ergebnissen des eindimensionalen Falles erkennbar.

4.2 Aufsummation der K-Instantonbeiträge

4.2.1 Numerische Summation

Bevor in einem nächsten Schritt die großkanonischen Summen ausgewertet werden, werden die oben gewonnenen Beiträge numerisch aufsummiert, um einen Eindruck von der Qualität der bisherigen Näherungen zu bekommen. Wie auch in den Monte-Carlo-Simulationen, wird hierbei das Volumen V jeweils so groß gewählt, daß der thermodynamische Limes erreicht ist. Eine Beschränkung nach oben bei der Wahl des Volumens ist bei der numerischen Summation jedoch weniger durch die Rechenzeit als durch die Größe der in Zähler und Nenner auftretenden Terme auferlegt.

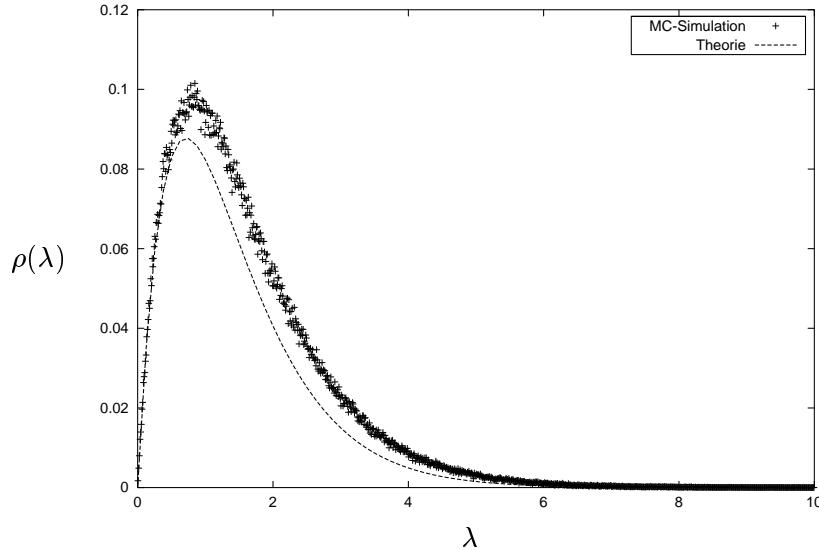


Abbildung 4.1: Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(2000, \lambda)$, $\nu = 1$, $\alpha = 1$, $\rho(500, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 numerisch aufsummiert; in beiden Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.

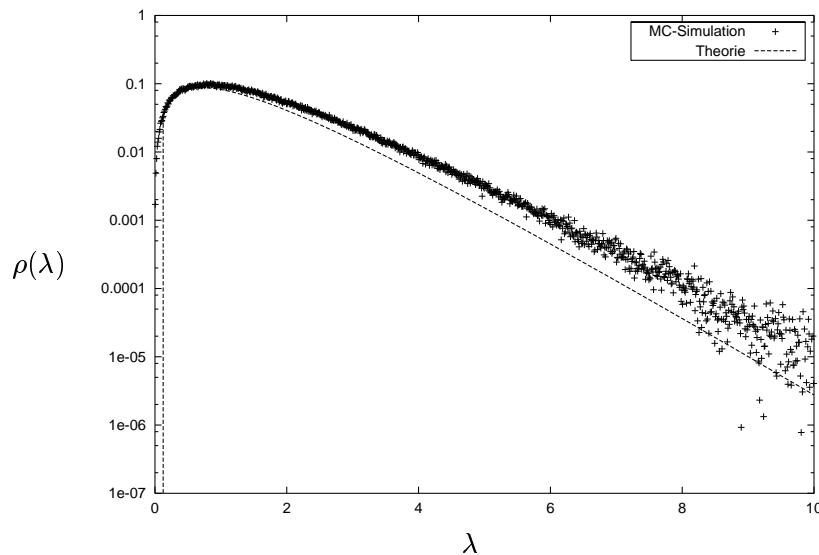


Abbildung 4.2: Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(2000, \lambda)$, $\nu = 1$, $\alpha = 1$, $\rho(500, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 numerisch aufsummiert, logarithmische Auftragung; in beiden Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.

Zunächst soll das Augenmerk auf den eindimensionalen Fall gerichtet werden, für den bereits eine exakte Beschreibung vorliegt. Insbesondere ist $b(\nu) = 1$, da vol-

le Raumausfüllung erreicht werden kann. In Abbildung 4.1 ist ersichtlich, daß die Verteilung der Radien qualitativ gut wiedergegeben wird. Das Ergebnis liegt jedoch insgesamt unter dem der Monte-Carlo-Simulation, das mit dem für den eindimensionalen Fall bekannten exakten Resultat übereinstimmt.

In der logarithmischen Auftragung des Diagramms 4.2 tritt hervor, daß auch in der hier zugrundeliegenden Näherung der exponentielle Abfall der Verteilung reproduziert wird.

Von größerer Bedeutung ist natürlich, wie sich die Abschätzungen für höhere Dimensionen verhalten. Dabei stellt sich auch das Problem der Wahl von $b(\nu)$. Den vorangegangenen Überlegungen folgend werden die Wahlen

$$\begin{aligned} b_1(\nu) &= 1 \\ b_2(\nu) &= 2^{\nu-1} \\ b_g(\nu) &= 2^{\frac{\nu-1}{2}} \end{aligned}$$

getroffen. Bei der Wahl von $b_1(\nu) = 1$ tritt im Bereich des Maximums zunächst gute Übereinstimmung mit den Monte-Carlo-Ergebnissen auf, jedoch wird mit zunehmender Dimension hier das Maximum überschätzt. Andererseits führt die Wahl von $b_2(\nu)$ zu einer Unterschätzung in diesem Bereich, so daß der Wert $b_g(\nu)$ hier insgesamt die besten Resultate liefert.

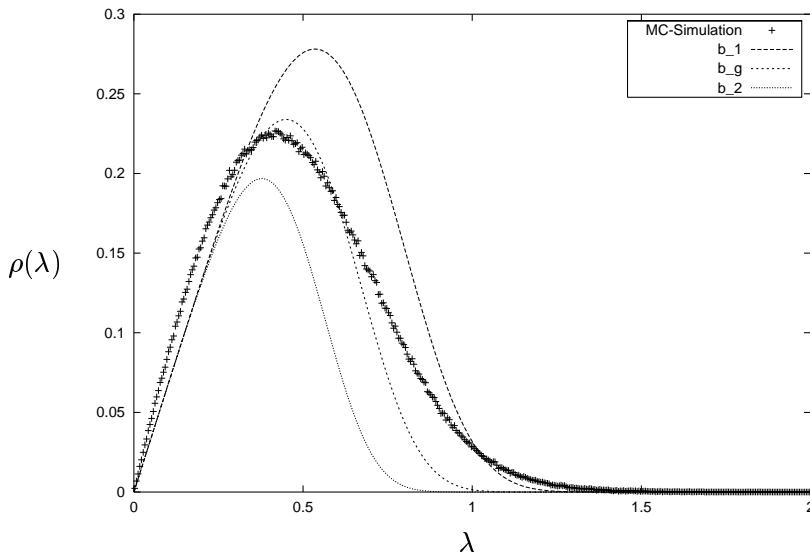


Abbildung 4.3: Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(10^4, \lambda)$, $\nu = 4$, $\alpha = 1$, $\rho(5^4, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 mit unterschiedlicher Wahl des Parameters $b(\nu)$ numerisch aufsummiert, von oben nach unten: $b_1(4)$, $b_g(4)$, $b_2(4)$; in allen Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.

Exemplarisch ist dies für $\nu = 4$ in Abbildung 4.3 dargestellt. Die durch Kreuze markierten Daten entstammen einer Monte-Carlo-Simulation, wohingegen die anderen drei Kurven von oben nach unten gerade wie beschrieben durch die Wahl von $b_1(4)$, $b_g(4)$ und $b_2(4)$ im theoretischen Ansatz entstehen. Auch hier soll das Verschwinden der Verteilung bei großen Werten von λ mit Hilfe einer logarithmischen Auftragung studiert werden.

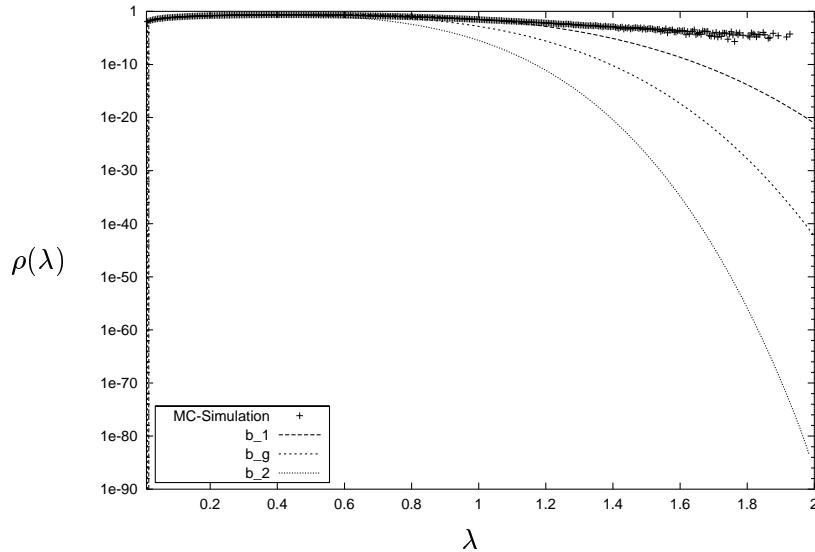


Abbildung 4.4: Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(10^4, \lambda)$, $\nu = 4$, $\alpha = 1$, $\rho(5^4, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 mit unterschiedlicher Wahl des Parameters $b(\nu)$ numerisch aufsummiert, von oben nach unten: $b_1(4)$, $b_g(4)$, $b_2(4)$, logarithmische Auftragung; in allen Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.

In Abbildung 4.4 tritt das Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation ganz oben auf, gefolgt von den Näherungen mit der Wahl von $b_1(4)$, $b_g(4)$ und $b_2(4)$. Alle vier Fälle sind verträglich mit der Annahme eines exponentiellen Abfalles, allerdings wird dieser in den analytischen Näherungen im Vergleich zu dem Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation größer geschätzt.

Dies ist im Rahmen der bisherigen Näherungen durchaus verständlich:

Hat das Testinstanton einen Radius im Bereich des Maximums der Verteilung, so liegt ein bzgl. der Radien recht homogenes Gas vor, und $b_g(\nu)$ sollte mit den Überlegungen aus dem Abschnitt 4.1.1 zu zufriedenstellenden Ergebnissen führen.

Vorausgesetzt, das Testinstanton hat einen sehr großen Radius, sind Konfigurationen mit wenigen Instantonen im vorgegebenen Volumen v bevorzugt, da das Auftreten von sehr kleinen Radien unwahrscheinlich ist. Also erzwingt ein sehr großes Instanton eine geringere Teilchenzahlldichte, was der Näherung durch $b_1(\nu)$ entspricht.

Nun liegt die Idee nahe, $b(\nu)$ dynamisch zu wählen; dies ist aber in den Rechnun-

gen nicht mehr angemessen zu behandeln. Darüber hinaus wird deutlich, daß selbst die minimale Wahl $b_1(\nu)$ für $b(\nu)$ bei sehr großen Instantonradien nicht wirklich zufriedenstellend mit den Monte-Carlo-Daten übereinstimmt. Offenbar werden die groben Fehler bei der Positionsintegration gemacht, aber auch in der Ausintegration der Radiuskoordinaten steckt ein gewisses Fehlerpotential.

4.2.2 Analytische Näherung und thermodynamischer Limes

Es steht schließlich noch aus, eine analytische Näherung für die Aufsummation

$$\rho(V, \lambda) = \frac{\sum_{K=1}^{\infty} K Z_K^{red}(V, \lambda)}{\sum_{K=0}^{\infty} V Z_K(V)} \quad (4.34)$$

$$= \frac{\sum_{K=0}^{\infty} (K+1) Z_{K+1}^{red}(V, \lambda)}{\sum_{K=0}^{\infty} V Z_K(V)} \quad (4.35)$$

der K -Instantonbeiträge zu erarbeiten. Hierzu sollen die zentralen Ideen aus der Behandlung des eindimensionalen Gases in Erinnerung gerufen werden. Für große Volumina V , d.h. im thermodynamischen Limes, tragen nur wenige Summanden wesentlich zur Summe bei, wobei das K , bei dem die Summanden maximal werden, natürlich selbst von V abhängt. Da aber gerade das Interesse am Verhalten im thermodynamischen Limes besteht, werden die Summen noch einmal durch Integrale genähert, um eine Sattelpunktsentwicklung durchführen zu können.

$$\rho(V, \lambda) \approx \frac{\int_0^\infty dk (k+1) Z_{k+1}^{red}(V, \lambda)}{\int_0^\infty dk V Z_k(V)} \quad (4.36)$$

Insbesondere werden die auftretenden Γ -Funktionen für große Werte von k durch die allgemeine Stirlingsche Formel (2.25)

$$\Gamma(x+1) \approx \sqrt{2\pi} (x+1)^{x+\frac{1}{2}} e^{-(x+1)} \quad (4.37)$$

sehr gut approximiert. Im Gegensatz zum bisherigen Vorgehen sollen nun aber Terme, die zu Ausdrücken ohne Relevanz im thermodynamischen Limes Anlaß geben, direkt vernachlässigt werden, um die Rechnungen möglichst übersichtlich zu gestalten.

Behandlung des Nenners

Betrachtet wird zunächst

$$\begin{aligned} V Z_k(V) &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{\sqrt{k}}{\nu} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \frac{C}{(k\tau b(\nu))^{\beta-1}} \right)^k \frac{\Gamma((\beta-1)k)}{\Gamma(\beta k + 1)} V^{\beta k + 1} \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{1}{\nu} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} C \left(\frac{\beta-1}{\tau b(\nu)} \right)^{\beta-1} \right)^k \sqrt{k} ((\beta-1)k)^{-(\beta-1)k} \frac{\Gamma((\beta-1)k)}{\Gamma(\beta k + 1)} V^{\beta k + 1}, \end{aligned}$$

wobei (4.37) genutzt wird

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{k}((\beta - 1)k)^{-(\beta-1)k} \frac{\Gamma((\beta - 1)k)}{\Gamma(\beta k + 1)} \\
 & \approx \frac{1}{\sqrt{\beta - 1}} ((\beta - 1)k)^{-(\beta-1)k+\frac{1}{2}} \frac{((\beta - 1)k)^{(\beta-1)k-\frac{1}{2}}}{(\beta k + 1)^{\beta k+\frac{1}{2}}} e^{k+1} \\
 & = \frac{1}{\sqrt{\beta - 1}} (\beta k + 1)^{-(\beta k+\frac{1}{2})} e^{k+1},
 \end{aligned}$$

so daß

$$VZ_k(V) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{1}{\nu \sqrt{\beta - 1}} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} C \left(\frac{\beta - 1}{\tau b(\nu)} \right)^{\beta-1} \right)^k (\beta k + 1)^{-(\beta k+\frac{1}{2})} e^{k+1} V^{\beta k+1}. \quad (4.38)$$

Mit der Ersetzung

$$\gamma = \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} C \left(\frac{(\beta - 1)}{\tau b(\nu)} \right)^{\beta-1} \quad (4.39)$$

stellen sich die Beiträge des Nenners dar durch

$$\begin{aligned}
 VZ_k(V) &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{1}{\nu \sqrt{\beta - 1}} \gamma^k (\beta k + 1)^{-(\beta k+\frac{1}{2})} e^{k+1} V^{\beta k+1} \\
 &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{eV}{\nu \sqrt{\beta - 1}} (\beta k + 1)^{-(\beta k+\frac{1}{2})} e^k (\gamma^{\frac{1}{\beta}} V)^{\beta k} \\
 &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{eV}{\nu \sqrt{\beta - 1}} e^{-(\beta k+\frac{1}{2}) \ln(\beta k + 1) + k(1 + \beta \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} V))}.
 \end{aligned}$$

Das Maximum des Exponenten wird aus der Gleichung

$$\begin{aligned}
 0 &\stackrel{!}{=} -\beta \ln(\beta k_{max} + 1) - \beta \frac{\beta k_{max} + \frac{1}{2}}{\beta k_{max} + 1} + 1 + \beta \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} V) \\
 &\stackrel{k_{max} \gg 0}{\approx} -\beta \ln(\beta k_{max} + 1) - (\beta - 1) + \beta \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} V)
 \end{aligned}$$

errechnet zu

$$k_{max} \approx \frac{1}{\beta} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V - 1 \right), \quad (4.40)$$

und der Integrand verhält sich bei Entwicklung um diesen Punkt folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
 VZ_k(V) &\approx \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{eV}{\nu \sqrt{\beta - 1}} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-\frac{1}{2}} e^{\left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V - 1 \right)} e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-1} \delta^2} \\
 &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{V}{\nu \sqrt{\beta - 1}} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-\frac{1}{2}} e^{e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V} e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-1} \delta^2}
 \end{aligned}$$

$$\delta = k - k_{max}.$$

Also wird der Nenner in (4.36) abgeschätzt durch

$$\int_0^\infty dk V Z_k(V) \approx \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{V}{\nu \sqrt{\beta - 1}} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-\frac{1}{2}} e^{e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V} \times \int_{-k_{max}}^\infty d\delta e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-1} \delta^2}, \quad (4.41)$$

und unter Berücksichtigung von

$$\begin{aligned} \frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-1} &> 0 \\ k_{max} &\gg 0 \end{aligned}$$

wird das Gauß-Integral gelöst zu

$$\int_{-k_{max}}^\infty d\delta e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{-1} \delta^2} \approx \frac{\sqrt{2\pi}}{\beta} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V \right)^{\frac{1}{2}},$$

so daß schließlich

$$\int_0^\infty dk V Z_k(V) \approx \sqrt{\frac{\alpha}{\beta^2(\beta-1)}} \frac{V}{\nu} e^{e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} V}. \quad (4.42)$$

Behandlung des Zählers

Ganz analog werden nun noch einmal die Auswertungsschritte, die bereits bei der Bestimmung der Normierungsgröße durchgeführt wurden, durchlaufen.

$$\begin{aligned} (k+1)Z_{k+1}^{red}(V, \lambda) &\approx \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{C \lambda^\alpha \sqrt{k} (k+1)}{\nu} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \frac{C}{(k \tau b(\nu))^{\beta-1}} \right)^k \frac{\Gamma((\beta-1)k)}{\Gamma(\beta k + 2)} \tilde{V}^{\beta k + 1} \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{C \lambda^\alpha}{\nu} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} C \left(\frac{(\beta-1)}{\tau b(\nu)} \right)^{\beta-1} \right)^k \times \\ &\quad \sqrt{k} (k+1) ((\beta-1)k)^{-(\beta-1)k} \frac{\Gamma((\beta-1)k)}{\Gamma(\beta k + 2)} \tilde{V}^{\beta k + 1} \end{aligned}$$

Die Gamma-Funktionen können mit (4.37) ausgedrückt werden durch

$$\begin{aligned} &\sqrt{k} (k+1) ((\beta-1)k)^{-(\beta-1)k} \frac{\Gamma((\beta-1)k)}{\Gamma(\beta k + 2)} \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{\beta-1}} (k+1) ((\beta-1)k)^{-(\beta-1)k+\frac{1}{2}} \frac{((\beta-1)k)^{(\beta-1)k-\frac{1}{2}}}{(\beta k + 2)^{\beta k + \frac{3}{2}}} e^{k+2} \\ &= \frac{(k+1)}{\sqrt{\beta-1} (\beta k + 2)} \frac{1}{(\beta k + 2)^{\beta k + \frac{1}{2}}} e^{k+2} \\ &\stackrel{k \gg 0}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\beta^2(\beta-1)}} (\beta k + 2)^{-(\beta k + \frac{1}{2})} e^{k+2} \end{aligned}$$

und mit der Abkürzung

$$\gamma = \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} C \left(\frac{(\beta - 1)}{\tau b(\nu)} \right)^{\beta-1} \quad (4.43)$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} (k+1)Z_{k+1}^{red}(V, \lambda) &\approx \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{C\lambda^\alpha}{\nu\sqrt{\beta^2(\beta-1)}} \gamma^k (\beta k + 2)^{-(\beta k + \frac{1}{2})} e^{k+2} \tilde{V}^{\beta k + 1} \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{e^2 \tilde{V} C \lambda^\alpha}{\nu\sqrt{\beta^2(\beta-1)}} (\beta k + 2)^{-(\beta k + \frac{1}{2})} e^k (\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V})^{\beta k} \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{e^2 \tilde{V} C \lambda^\alpha}{\nu\sqrt{\beta^2(\beta-1)}} e^{-(\beta k + \frac{1}{2}) \ln(\beta k + 2) + k(1 + \beta \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V}))}. \end{aligned}$$

Nun ist die Bestimmungsgleichung für den Ort des Maximums des Integranden gegeben durch

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} -\beta \ln(\beta k_{max} + 2) - \frac{\beta(\beta k_{max} + \frac{1}{2})}{\beta k_{max} + 2} + 1 + \beta \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V}) \\ &\stackrel{k_{max} \gg 0}{\approx} -\beta \ln(\beta k_{max} + 2) - (\beta - 1) + \beta \ln(\gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V}), \end{aligned}$$

so daß

$$k_{max} \approx \frac{1}{\beta} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} - 2 \right) \quad (4.44)$$

den Entwicklungspunkt für die Gaußsche Näherung angibt:

$$\begin{aligned} (k+1)Z_{k+1}^{red}(V, \lambda) &\approx \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{e^2 \tilde{V} C \lambda^\alpha}{\nu\sqrt{\beta^2(\beta-1)}} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-\frac{1}{2}} e^{\left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} - 2 \right)} e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-1}} \delta^2 \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{\tilde{V} C \lambda^\alpha}{\nu\sqrt{\beta^2(\beta-1)}} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-1}} \delta^2 \\ &\quad \delta = k - k_{max}. \end{aligned}$$

Eine Zusammenföhrung der bisherigen Ergebnisse liefert

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk (k+1)Z_{k+1}^{red}(V, \lambda) &\approx \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{\tilde{V} C \lambda^\alpha}{\nu\sqrt{\beta^2(\beta-1)}} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \times \\ &\quad \int_{-k_{max}}^\infty d\delta e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-1}} \delta^2. \quad (4.45) \end{aligned}$$

Unter Beachtung von

$$\begin{aligned} \frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-1} &> 0 \\ k_{max} &\gg 0, \end{aligned}$$

wird das Gauß-Integral ausgewertet

$$\int_{-k_{max}}^{\infty} d\delta e^{-\frac{\beta^2}{2} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{-1} \delta^2} \approx \frac{\sqrt{2\pi}}{\beta} \left(e^{-\frac{\beta-1}{\beta}} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V} \right)^{\frac{1}{2}},$$

so daß

$$\int_0^{\infty} dk (k+1) Z_{k+1}^{red}(V, \lambda) \approx \sqrt{\frac{\alpha}{\beta^2(\beta-1)}} \frac{\tilde{V} C \lambda^{\alpha}}{\beta \nu} e^{-\frac{\beta-1}{\beta} \gamma^{\frac{1}{\beta}} \tilde{V}}. \quad (4.46)$$

Die Verteilung $\rho(\lambda)$

Eine Zusammenstellung der Resultate der vorangehenden beiden Abschnitte liefert folgende Formel für die Verteilung der Instantonradien:

$$\rho(V, \lambda) \approx \frac{C}{\beta} \frac{\tilde{V}}{V} \lambda^{\alpha} e^{-\frac{\beta-1}{\beta} \gamma^{\frac{1}{\beta}} (\tilde{V} - V)}. \quad (4.47)$$

Mit

$$\tilde{V} = V - b(\nu) \tau \lambda^{\nu}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\tilde{V}}{V} &= 1 \\ \tilde{V} - V &= -b(\nu) \tau \lambda^{\nu}. \end{aligned}$$

Und durch die Rücksubstitution von

$$\gamma = \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} C \left(\frac{(\beta-1)}{\tau b(\nu)} \right)^{\beta-1}$$

wird im thermodynamischen Limes die folgende Verteilung erreicht:

$$\begin{aligned} \rho(\lambda) &= \frac{C \nu}{\kappa} \lambda^{\kappa - \nu - 1} e^{-(C \vartheta(\kappa, \nu) b(\nu) \tau)^{\frac{\nu}{\kappa}} \lambda^{\nu}} \\ \vartheta(\kappa, \nu) &= \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa - \nu - 1}} \left(\frac{\kappa}{\nu} - 1 \right)^{\frac{\kappa}{\nu} - 1} e^{-(\frac{\kappa}{\nu} - 1)} \end{aligned} \quad (4.48)$$

Dieses Ergebnis erklärt das potenzartige Anwachsen der Verteilung der Radien. Ebenfalls in Übereinstimmung mit den Monte-Carlo-Ergebnissen wird ein exponentielles Verschwinden bei großen Argumenten vorgegeben.

In diesem Zusammenhang ist natürlich die Frage von Bedeutung, in welcher Beziehung dieser Ausdruck zu der Verteilung steht, die in einer Dimension ν exakt

angegeben werden kann. Dazu wird noch einmal auf die Formeln (2.41) und (2.42) zurückgegriffen:

$$\begin{aligned}\rho(\lambda) &= \frac{C}{\alpha+2} \lambda^\alpha e^{-(C\Gamma(\alpha+1)\tau)^{\frac{1}{\alpha+2}}\lambda} \\ &\stackrel{\nu=1}{=} \frac{C\nu}{\kappa} \lambda^{\kappa-\nu-1} e^{-(C\Gamma(\frac{\kappa}{\nu}-1)\tau)^{\frac{\nu}{\kappa}}\lambda^\nu}.\end{aligned}$$

Die Übereinstimmungen treten in dieser Darstellung deutlich hervor, insbesondere ist $b(1) = 1$, da die Instantonen in einer Dimension den Raum vollständig ausfüllen können.

Vielleicht wird nicht direkt klar, in welcher Relation $\vartheta(\kappa, \nu)$ und $\Gamma(\frac{\kappa}{\nu}-1)$ zueinander stehen. Grundsätzlich kann natürlich nicht erwartet werden, mit den im allgemeinen Fall viel größer angesetzten Näherungen das Ergebnis für den eindimensionalen Fall exakt zu reproduzieren, aber für $\kappa \gg \nu$ sieht man

$$\begin{aligned}\vartheta(\kappa, \nu) &= \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa - \nu - 1}} \left(\frac{\kappa}{\nu} - 1\right)^{\frac{\kappa}{\nu}-1} e^{-(\frac{\kappa}{\nu}-1)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\nu}} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\frac{\kappa}{\nu} - 1 - \frac{1}{\nu}}} \left(\frac{\kappa}{\nu} - 1\right)^{\frac{\kappa}{\nu}-1} e^{-(\frac{\kappa}{\nu}-1)} \\ &\stackrel{\kappa \gg \nu}{\approx} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\nu}} \left(\frac{\kappa}{\nu} - 1\right)^{\frac{\kappa}{\nu}-\frac{3}{2}} e^{-(\frac{\kappa}{\nu}-1)} \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{\nu}} \Gamma\left(\frac{\kappa}{\nu} - 1\right),\end{aligned}$$

wobei die Formel (4.37) ausgenutzt wird. Damit kann für diesen Fall (4.48) entsprechend einfacher dargestellt werden:

$$\kappa \gg \nu \quad \Rightarrow \quad \rho(\lambda) = \frac{C\nu}{\kappa} \lambda^{\kappa-\nu-1} e^{-(C\Gamma(\frac{\kappa}{\nu}-1)\nu^{-\frac{1}{2}}b(\nu)\tau)^{\frac{\nu}{\kappa}}\lambda^\nu}$$

(4.49)

Fehlerabschätzung

In Abschnitt 4.2.1 wurde eine qualitative Abschätzung der Fehler, die bei der Auswertung der Integrale im kanonischen Ensemble auftreten, vorgenommen. Nun stellt sich die Frage, ob durch die obigen Rechenschritte weitere Informationen im thermodynamischen Limes verloren gehen. Zu vergleichen sind also die Vorgaben der Formel (4.48) mit den Ergebnissen der numerischen Aufsummation. Wie in Abbildung 4.5 deutlich wird, liegt hier hervorragende Übereinstimmung vor, so daß Verbesserungen allenfalls bei der Abschätzung der Integrale im Kapitel 4.1 wünschenswert sind.

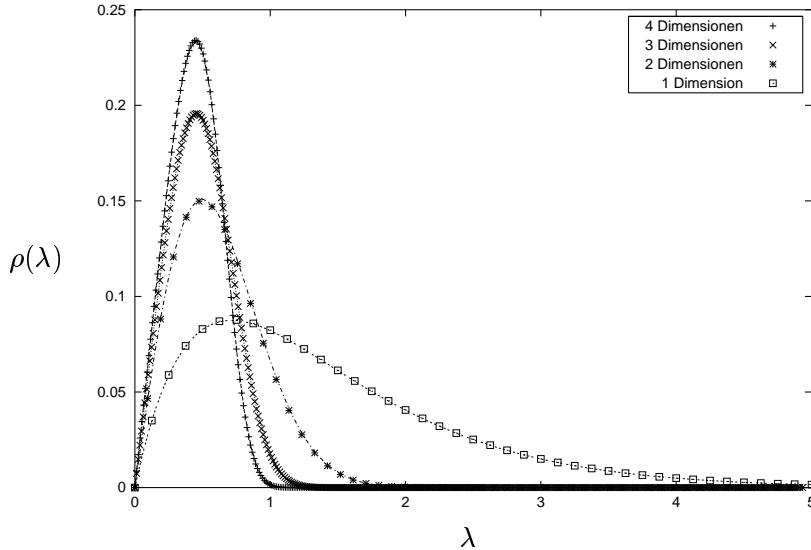


Abbildung 4.5: Vergleich von Formel (4.48) mit dem entsprechenden Ergebnis der numerischen Aufsummation der Näherungen aus Abschnitt 4.1 für $\nu = 1, \dots, 4$, $\alpha = 1$, $V = 500, 20^2, 10^3, 5^4$ (von unten nach oben)

4.3 Theorie und Simulationen für $\nu = 4$

Da sich die Ergebnisse für die Radiusverteilung $\rho(\lambda)$ qualitativ in unterschiedlichen Raum-Zeit-Dimensionen kaum unterscheiden, soll hier exemplarisch nur der interessante Fall von vier Raum-Zeit-Dimensionen etwas ausführlicher diskutiert werden. Insbesondere stellt sich die Frage, inwieweit in den Monte-Carlo-Simulationen der thermodynamische Limes bei den vorgegebenen Systemvolumina bereits erreicht ist. Während in dem System, das durch die analytischen Näherungen beschrieben wird, wie in Abbildung 4.5 ersichtlich, schon für $V = 5^4$ ein sehr gutes Grenzverhalten vorliegt, sind bei dem numerischen Zugang offenbar größere Volumina erforderlich. Ein erster Eindruck hierzu wird in Abbildung 4.6 vermittelt.

Dargestellt ist die Entwicklung der Instantonzahl während der Simulation nach Erreichen der Gleichgewichtsverteilung P , wobei die Teilchenzahlen der kleineren Volumina geeignet hochskaliert wurden. Es wird deutlich, wie die relative Schwankung der vorliegenden Instantonen mit zunehmendem Volumen ausstirbt, also der thermodynamische Limes angenähert wird. Andererseits wächst natürlich, wie in Abbildung 4.7 ersichtlich, die exponentielle Autokorrelationszeit mit dem Systemvolumen. Sie ist ein Maß ist für die Geschwindigkeit, mit der die Konvergenz des stochastischen Prozesses der Monte-Carlo-Simulation gegen die Grenzverteilung erfolgt [21] und bestimmt so auch die Rechenzeit mit. Das Volumen $V = 5^4 = 625$ wurde in Abbildung 4.7 nicht berücksichtigt, da die Daten die anderen Ergebnisse aufgrund der großen Schwankungen überdecken würden.

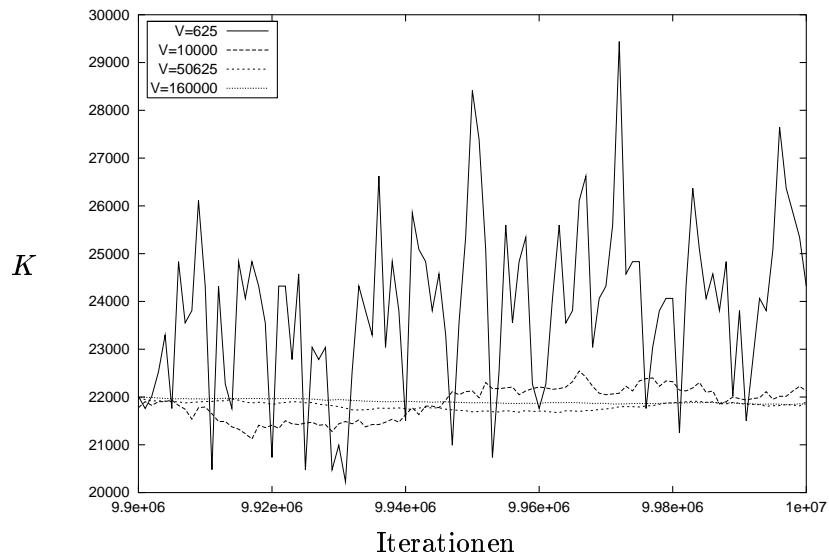


Abbildung 4.6: Instantonzahl während der Simulation für $V = 5^4, 10^4, 15^4, 20^4$ nach Erreichen des Gleichgewichtes und geeigneter Umskalierung ($\alpha = 1, C = 1$), die Messungen erfolgen im Abstand von 1000 Iterationsschritten.

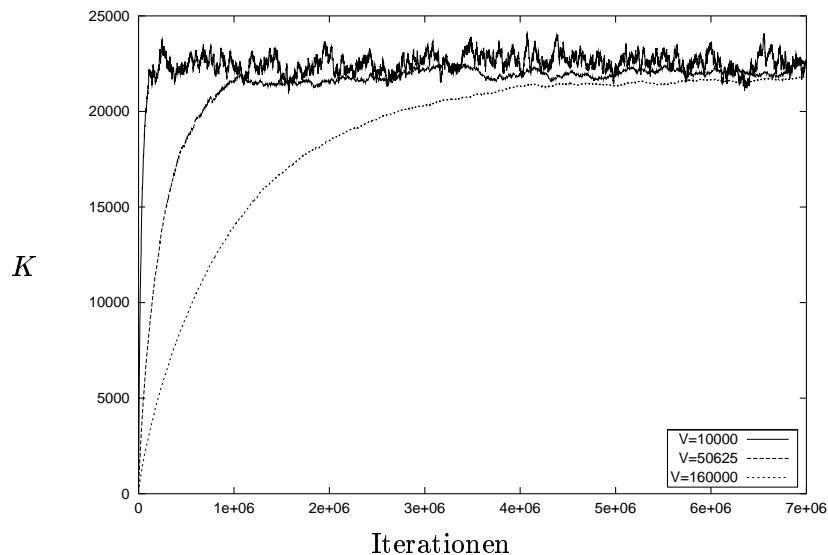


Abbildung 4.7: Entwicklung der Instantonzahl nach Simulationsbeginn mit $V = 10^4, 15^4, 20^4$ nach geeigneter Umskalierung, die Messungen erfolgen im Abstand von 1000 Iterationsschritten.

Die Aufnahme des Histogramms über die Instantonradien beginnt bei Übergang der Instantonzahl in eine Sättigung.

Auch das Grenzverhalten der Radiusverteilung im thermodynamischen Limes wird untersucht. In der Abbildung 4.8 wird dargestellt, wie sich die Verteilung $\rho(V, \lambda)$ bei der Wahl der obigen Volumina $V = 5^4, 10^4, 15^4, 20^4$ gegen eine Grenzverteilung $\rho(\lambda)$ entwickelt.

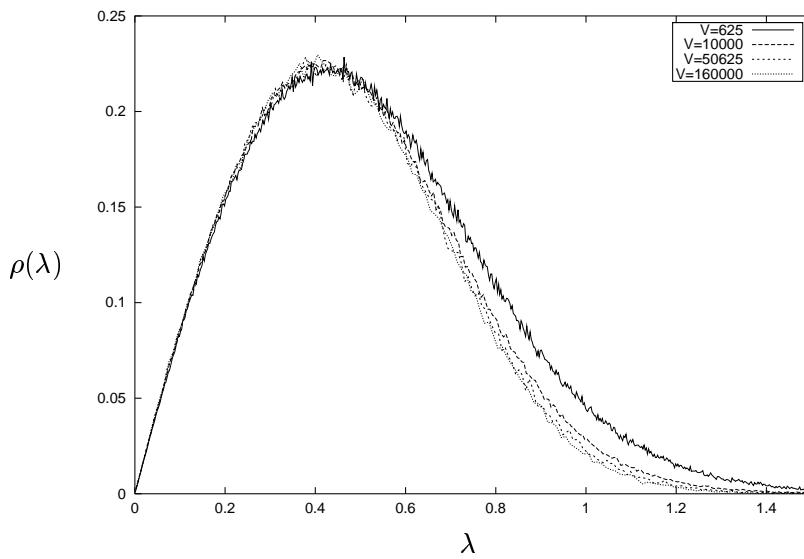


Abbildung 4.8: Verteilung der Instantonradien bei Simulationen mit $V = 5^4, 10^4, 15^4, 20^4$ (von oben nach unten); um bessere Auflösung zu erzielen, wurden die Meßpunkte durch Linien verbunden.

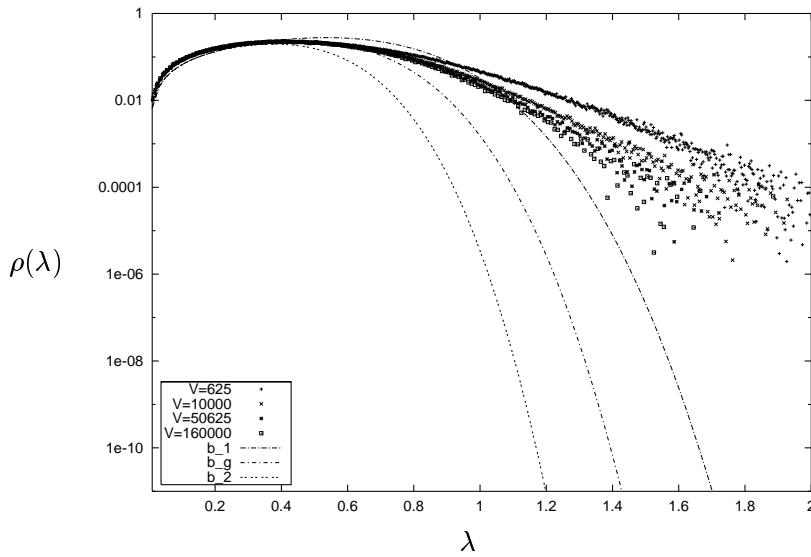


Abbildung 4.9: Verteilung der Instantonradien bei Simulationen mit $V = 5^4, 10^4, 15^4, 20^4$ (von oben nach unten) sowie theoretische Näherung (Formel (4.48)) mit $b(4) = b_1(4), b_g(4), b_2(4)$ (von oben nach unten), logarithmische Auftragung

Dabei kann zunächst vermutet werden, daß sich die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen für den Abfall der Verteilung bei großen Radien im thermodynamischen Limes an die Vorgaben der Theorie anlehnenden. Die Betrachtung von Abbildung 4.9 schließt dies allerdings weitgehend aus. Dargestellt sind die gleichen Daten in logarithmischer Auftragung. Es ist zu erkennen, wie sich die Histogramme mit wachsendem Volumen zwar untereinander aber offenbar nicht beliebig den theoretischen Vorgaben annähern. Da schon im Falle eines Volumens von $V = 10^4$ eine zufriedenstellende Konvergenz zu beobachten ist, wurde dieses Volumen bei den Simulationen aufgrund der vertretbaren Rechenzeit gewählt.

Interessant ist auch die Untersuchung der Verteilung bei verschiedenen Werten von $\alpha = \kappa - \nu - 1 = \kappa - 5$, wobei sich κ in $SU(N)$ -YANG-MILLS-Theorien verhält wie [14]

$$\kappa = \frac{11}{3}N. \quad (4.50)$$

Für die $SU(2)$ und $SU(3)$ ergeben sich damit Werte von $\kappa = 7\frac{1}{3}$ und $\kappa = 11$, bzw. $\alpha = 2\frac{1}{3}$ und $\alpha = 6$. Die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen sind in Abbildung 4.10 für $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$ dargestellt.

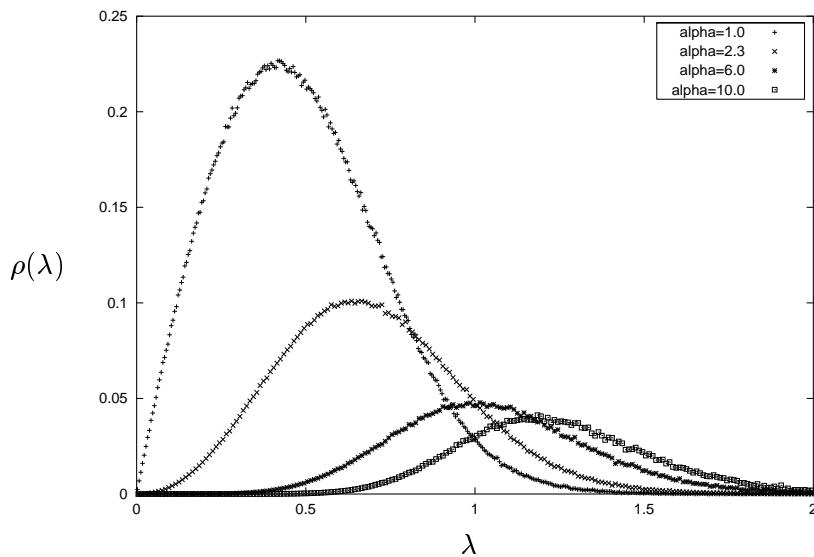


Abbildung 4.10: Verteilung der Instantonradien bei Simulationen mit $V = 10^4$, $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$

Offensichtlich weitet sich die Verteilung unter Zunahme von α bzw. κ auf, wobei ihr Maximum zu größeren Werten von λ verschoben wird.

Zum Vergleich sind in Abbildung 4.11 die entsprechenden Resultate aus Formel (4.48) mit $b(4) = b_g(4) = 2\sqrt{2}$ aufgetragen. Diese stimmen in ihrem qualitativen Verhalten unter Variation von α sehr gut mit den Vorgaben der Monte-Carlo-Daten überein.

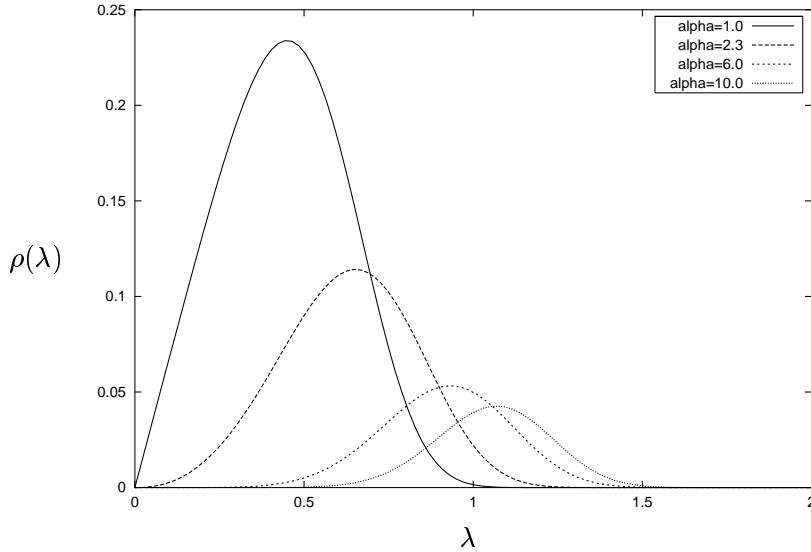


Abbildung 4.11: $\rho(\lambda)$ aus Formel (4.48), $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$, $b_g(4) = 2\sqrt{2}$

Während das Maximum der Verteilung mit wachsendem α abflacht, werden größere Radien wahrscheinlicher, was in der logarithmischen Auftragung der Monte-Carlo-Ergebnisse für den Bereich jenseits der Maxima deutlich wird.

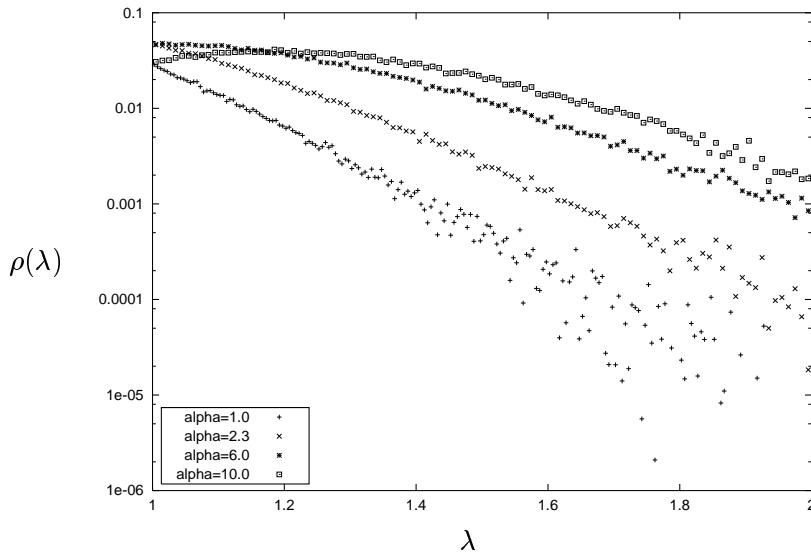


Abbildung 4.12: Abfall der Verteilungen jenseits der Maxima bei Simulationen mit $V = 10^4$, $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$, logarithmische Auftragung

Abbildung 4.12 enthält jedoch noch wenig Information über den asymptotischen Abfall dieser Verteilungen, da im Bild der theoretischen Betrachtungen mit wachsendem α der Vorfaktor λ^α den Exponentialanteil länger dominiert.

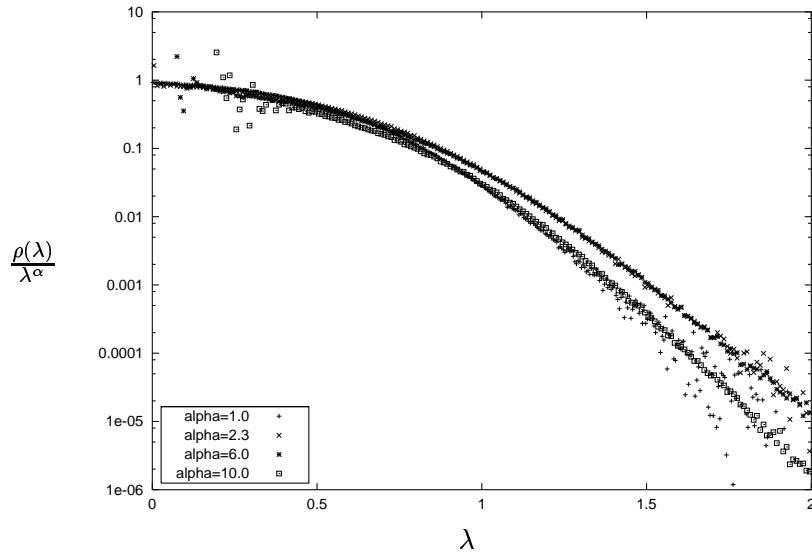


Abbildung 4.13: Abfall von $\frac{\rho(\lambda)}{\lambda^\alpha}$ bei Simulationen mit $V = 10^4$, $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$, logarithmische Auftragung

Zu untersuchen sind entsprechend auch die durch diese λ -Faktoren dividierten Daten. Hier liegen die Kurven für die verschiedenen Werte von α in Abbildung 4.13 wieder eng beieinander. Dabei wird der Abfall der Verteilung mit wachsendem α zunächst geringer, nimmt dann aber wieder zu. Dies kann bei Studium der theoretischen Resultate (vgl. Formel (4.48)) reproduziert werden. Allerdings treten bei genauerer Auswertung der Daten in Abbildung 4.13 Abweichungen zum erwarteten Vorfaktor $\frac{C\nu}{\kappa}$ aus Formel (4.48) hervor. Diese Unterschiede in dem Normierungsfaktor spiegeln ebenfalls die Differenzen der beiden Ansätze in den Vorgaben für das Verschwinden der Verteilung bei großen Argumenten wider. So bleibt auch hier festzuhalten, daß die theoretischen Vorgaben zwar den exponentiellen Abfall wiedergeben, ihn aber überschätzen.

Um quantitative Aussagen über das Verschwinden der Verteilungen, wie sie die Monte-Carlo-Simulationen liefern, machen zu können, wird für $F(\lambda) = \frac{\rho(\lambda)}{\lambda^\alpha}$ zunächst ein Ansatz der Form

$$F_{fit}(\lambda) = ae^{-b\lambda^p} \quad (4.51)$$

gemacht. Da a nicht mit den Vorgaben aus Formel (4.48) übereinstimmt, wird a durch Extrapolation von $F(\lambda)$ für kleine Argumente gewonnen ($a = F_{fit}(0)$). Die Parameter b und p werden mit Hilfe eines Fitprogrammes auf Basis des Marquardt-Levenberg-Algorithmus abgeschätzt.

α	1	$2\frac{1}{3}$	6	10
b	3.6	3.0	3.2	3.7
p	1.9	2.0	1.8	1.8

Tabelle 4.1: Ergebnis der Fits an die Monte-Carlo-Daten mit F_{fit} für $\nu = 4$, $\alpha = 1$, $2\frac{1}{3}$, 6, 10, Fehler ca. ± 0.1

In Tabelle 4.1 wird deutlich, daß die auftretende Potenz p etwa zwei ist. Damit ist p nur halb so groß wie die theoretische Vorgabe $p = \nu = 4$. Allerdings ist dies konsistent mit den Ergebnis $p = 2$ in [15]. Offenbar hat eine Variation von α nur auf den Faktor b wesentlichen Einfluß, nicht jedoch auf p . Eine entsprechende Abhängigkeit findet sich auch in Formel (4.48). Exemplarisch ist das Ergebnis eines Fits mit $\alpha = 2\frac{1}{3}$, $a = 0.85$, $b = 3.0$ und $p = 2.0$ in Abbildung 4.14 dargestellt.

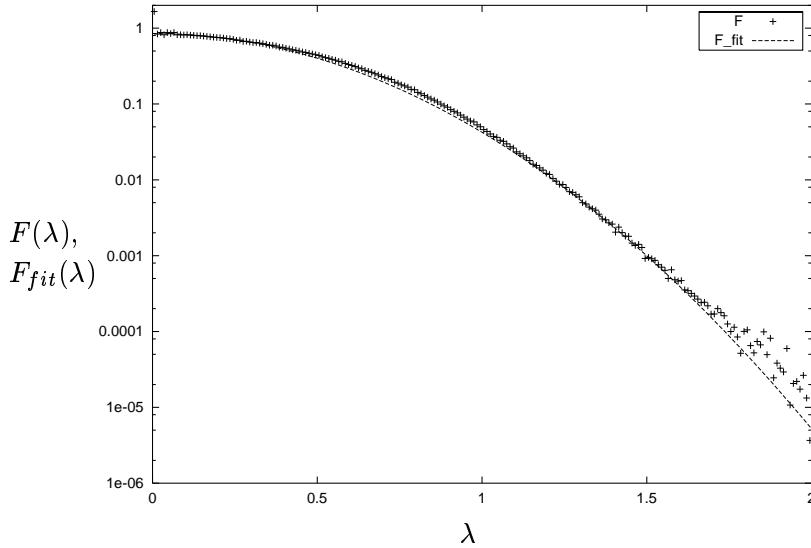


Abbildung 4.14: Ergebnis des Fits an $F(\lambda) = \frac{\rho(\lambda)}{\lambda^\alpha}$ mit $\alpha = 2\frac{1}{3}$ aus einer Monte-Carlo-Simulation mit $V = 10^4$: $a = 0.85$, $b = 3.0$, $p = 2.0$, logarithmische Auftragung

Um dies in einen etwas weiteren Kontext stellen zu können, wird das Verhalten der Potenz p in den Monte-Carlo-Simulationen verschiedener Raum-Zeit-Dimensionen untersucht. In Tabelle 4.2 wird deutlich, wie die Potenz p , die den Abfall der Verteilung bestimmt, mit zunehmender Dimension wächst. Dabei stimmt das Ergebnis in einer Dimension mit hoher Genauigkeit mit dem exakten Resultat des Kapitels 2 überein.

ν	1	2	3	4
p	1.0	1.5	1.8	1.9

Tabelle 4.2: Ergebnis der Fits an die Monte-Carlo-Daten mit F_{fit} für $\nu = 1, 2, 3, 4$, $\alpha = 1$, Fehler ca. ± 0.1

Nach diesen Diskussionen zum Verhalten der Verteilung $\rho(\lambda)$ bei großen Argumenten wird abschließend eine Variation in C vorgenommen. Dieser Parameter enthält die Integrale über die verbleibenden kollektiven Koordinaten sowie die Kopplungs- konstante. In Abbildung 4.15 sind die Monte-Carlo-Ergebnisse mit den theoretischen Vorgaben für $C = 10$ dargestellt. Auch hier werden alle bisherigen Ergebnisse bestätigt.

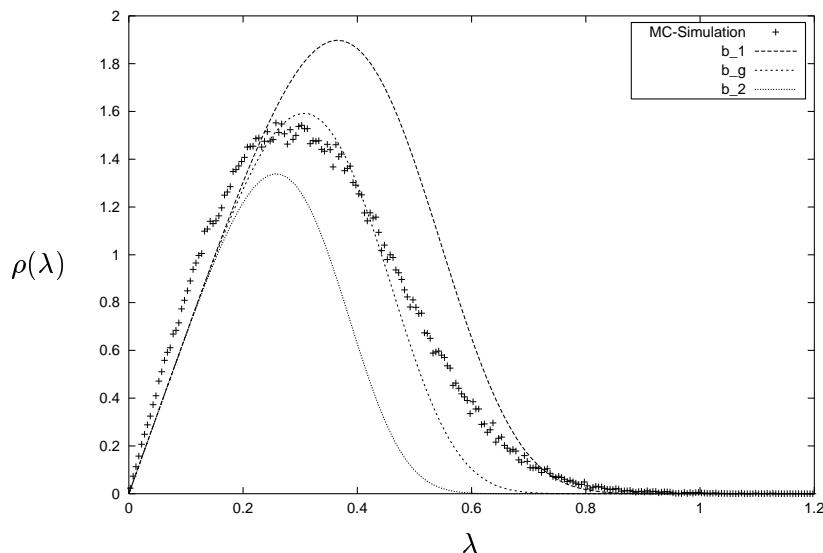


Abbildung 4.15: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für $V = 10^4$, $\alpha = 1$, $C = 10$, sowie theoretische Vorgaben aus Formel (4.48), $b(4) = b_1(4)$, $b_g(4)$, $b_2(4)$

Zusammenfassung und Ausblick

Ergebnisse

In dieser Arbeit wurde die Radiusverteilung in einem Instantongas aus harten Kugeln untersucht. In der vorliegenden Näherung lässt sich die Verteilung im eindimensionalen Fall bei Erreichen des thermodynamischen Limes exakt analytisch bestimmen. Es bildet sich dabei ein potenzartiges Anwachsen sowie ein exponentieller Abfall der Wahrscheinlichkeitsdichte aus.

Für den allgemeineren Fall beliebiger Raum-Zeit-Dimension wurden sowohl analytische als auch numerische Methoden zur Betrachtung herangezogen.

Hierbei wurden im analytischen Zugang zunächst die interessierenden Integrale mit Hilfe von Sattelpunktsentwicklungen und geometrischen Abschätzungen ausgewertet. Schließlich wurden die Summen im großkanonischen Ensemble durch Integrale ersetzt, die ebenfalls im Rahmen einer Sattelpunktnäherung abgeschätzt wurden. Hierbei erfahren die Sattelpunktsentwicklungen gerade im thermodynamischen Limes ihre Rechtfertigung. Die Ergebnisse für die Verteilung ρ sind in Übereinstimmung mit dem exakten Resultat des eindimensionalen Falles von der Form

$$\rho(\lambda) \sim \lambda^{\kappa-\nu-1} e^{-\text{const.}\lambda^\nu}.$$

Parallel dazu wurde das allgemeine System durch Anwendung großkanonischer Monte-Carlo-Simulationen untersucht. Hier wird qualitativ eine sehr gute Übereinstimmung mit den analytischen Ergebnissen erreicht; gerade für kleine Radien wird der Exponent des obigen potenzartigen Anwachsens sehr gut reproduziert. Auch der Ort des Maximums der Verteilung ist konsistent mit den theoretischen Resultaten. Schließlich wird ebenfalls in den Monte-Carlo-Daten ein exponentielles Abfallen der Verteilung bei großen Radien deutlich, jedoch wird dieses offenbar durch die analytischen Vorgaben überschätzt.

Zurückkehrend zu der zentralen Fragestellung dieser Arbeit bleibt also festzuhalten, daß im vorliegenden Modell das Integral über die Radiuskoordinaten der Instantonen in Übergangsmatrixelementen nicht divergiert, da große Radien exponentiell unterdrückt sind.

Ausblick

Weitergehend soll die Frage diskutiert werden, in welcher Form diese Arbeit fortgeführt werden kann, um zu Ergebnissen zu gelangen, die das Instantongas einer Eichtheorie besser beschreiben. Es ist sicherlich von Bedeutung, die Wechselwirkung zwischen den Instantonen realistischer zu beschreiben. Vor allem die dipolartigen Beiträge sollten berücksichtigt werden. Aber auch die Abhängigkeit der Wechselwirkung von der relativen Orientierung der Instantonen im Gruppenraum der Eichgruppe muß beachtet werden. Darüber hinaus ist zwischen Instantonen und Antiinstantonen zu unterscheiden [1]. Eine Arbeit mit diesen Ansätzen, aber einem etwas anderem Hard-Core-Anteil als dem hier gewählten, findet sich unter [15].

Im Bereich der Monte-Carlo-Simulationen besteht wesentliches Interesse an der Reduktion der Rechenzeit, die die Wahl des Systemvolumens einschränkt. Im Rahmen des einfachen METROPOLIS-Algorithmus, der den Simulationen dieser Arbeit zugrundeliegt, bestehen noch Möglichkeiten der Optimierung, die vor allem bei der Verbesserung der Vorschlagsakzeptanz zu suchen sind. Konkret kann das Annahmeverhalten durch die Wahl der maximalen Koordinatenbewegung pro Iterationsschritt beeinflußt werden. Jedoch fordert eine geringe Koordinatenbewegung bei hoher Akzeptanz viele Iterationsschritte, so daß i.a. eine Annahmewahrscheinlichkeit von 30% bis 50% gefordert wird. Weiterhin kann die Verteilung $p_{cr}(\lambda)$, nach der die Radiuskoordinaten generiert werden, der erwarteten Verteilung $\rho(\lambda)$ besser angepaßt werden, was zu einer Reduktion der Ablehnungen nach Koordinatenerzeugung führt.

Wesentliche Verbesserungen sind bei der Annahme der erzeugten Koordinaten anzustreben, die bei wachsender Teilchenzahldichte durch Kollisionen stark unterdrückt wird.

Hier müssen neue Konzepte eingebbracht werden, die ggf. noch einer detaillierteren Prüfung bedürfen, da großkanonische Monte-Carlo-Algorithmen nicht zu den erprobten Standardverfahren gehören. Ein möglicher Ansatz folgt der Idee, das großkanonische Ensemble durch reale und virtuelle Teilchen zu beschreiben, wobei alle Teilchen bewegt werden, aber nur erstere an der Wechselwirkung teilhaben. Die Teilchenzahl wird durch den Übergang von realen zu virtuellen Teilchen und umgekehrt variiert [34], [35]. Die Annahme neu vorgeschlagener Koordinaten ist wahrscheinlicher, da virtuelle Teilchen zunächst in der Nachbarschaft der Lücke bleiben, die ihre Vernichtung erzeugte. Allerdings führt dieses Verfahren möglicherweise noch zu einigen Unstimmigkeiten [25].

Angeregt durch die Methode des „Parallel Tempering“ [36], [37] ist zu überlegen, ob es einen Fortschritt bringt, parallel kanonische Monte-Carlo-Simulationen mit verschiedener Teilchenzahl durchzuführen, zwischen denen geeignete Übergänge bei der Messung vorgenommen werden. Hierzu muß im vorliegenden Modell zuvor ermittelt werden, welche Teilchenzahl sich mit welcher Schwankung bei vorgegebenem

Volumen im Gleichgewicht einstellt (vgl. Abbildung 4.6). Entsprechend wird die Teilchenzahl und die Anzahl der kanonischen Simulationen gewählt. In jedem Fall sind genauere Untersuchungen zum Konvergenzverhalten eines solchen Algorithmus unerlässlich.

Anhang A

Berechnung der Integrale

A.1 Integral über die Instantonpositionen

Zunächst wird durch vollständige Induktion gezeigt, daß sich der Wert des Integrales

$$\begin{aligned}\bar{I}_K(L) &= \int_{u(K-1)}^{L-\frac{\tau}{2}\lambda_K} da_K \int_{u(K-2)}^{a_K-\frac{\tau}{2}\lambda_K-\frac{\tau}{2}\lambda_{K-1}} da_{K-1} \dots \int_{\frac{\tau}{2}\lambda_1}^{a_2-\frac{\tau}{2}\lambda_2-\frac{\tau}{2}\lambda_1} da_1 \quad (\text{A.1}) \\ u(i) &= \tau \sum_{j=1}^i \lambda_j + \frac{\tau}{2} \lambda_{i+1}\end{aligned}$$

für $K \in \mathbb{N}$ ergibt zu

$$\bar{I}_K(L) = \frac{1}{K!} \left(L - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j \right)^K. \quad (\text{A.2})$$

Hierzu wird die offensichtliche Relation

$$\bar{I}_K(L) = \int_{u(K-1)}^{L-\frac{\tau}{2}\lambda_K} da_K \bar{I}_{K-1}(a_K - \frac{\tau}{2}\lambda_K) \quad (\text{A.3})$$

herangezogen.

1. Induktionsanfang: $K = 1$

$$\bar{I}_1(L) = \int_{\frac{\tau}{2}\lambda_1}^{L-\frac{\tau}{2}\lambda_1} da_1 = L - \tau\lambda_1 = \frac{1}{1!} (L - \tau\lambda_1)^1 \quad (\text{A.4})$$

2. Induktionsschritt: $K - 1 \rightarrow K$

Mit der Induktionsvoraussetzung

$$\bar{I}_{K-1}(a_K - \frac{\tau}{2}\lambda_K) = \frac{1}{(K-1)!} (a_K - \frac{\tau}{2}\lambda_K - \tau \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j)^{K-1} \quad (\text{A.5})$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \bar{I}_K(L) &= \int_{u(K-1)}^{L-\frac{\tau}{2}\lambda_K} da_K \frac{1}{(K-1)!} (a_K - \frac{\tau}{2}\lambda_K - \tau \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j)^{K-1} \\
 &= \frac{1}{(K-1)!} \frac{1}{K} (a_K - \frac{\tau}{2}\lambda_K - \tau \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j)^K \Big|_{\tau \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j + \frac{\tau}{2}\lambda_K}^{L-\frac{\tau}{2}\lambda_K} \\
 &= \frac{1}{K!} (L - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j)^K.
 \end{aligned}$$

A.2 Integral über die Instantonradien

Weitergehend soll nun das Integral I_K

$$I_K(L) = \frac{1}{K!} \int_0^{\frac{L}{\tau}} d\lambda_K \dots \int_0^{\frac{L}{\tau} - \sum_{j=2}^K \lambda_j} d\lambda_1 \prod_{j=1}^K \lambda_j^\alpha (L - \tau \sum_{j=1}^K \lambda_j)^K \quad (\text{A.6})$$

vollständig ausgewertet werden. Vorgegeben sei hierzu die Integralformel [18]

$$\int_0^1 x^a (1-x)^b dx = \frac{\Gamma(a+1)\Gamma(b+1)}{\Gamma(a+b+2)}. \quad (\text{A.7})$$

Zunächst wird zur Vereinfachung eine Substitution vorgenommen

$$\eta_j = \tau \lambda_j \quad \forall j \in \{1, \dots, K\}, \quad (\text{A.8})$$

die zu dem Ausdruck

$$I_K(L) = \frac{1}{\tau^{(\alpha+1)K}} \frac{1}{K!} \int_0^L d\eta_K \dots \int_0^{L - \sum_{j=2}^K \eta_j} d\eta_1 \prod_{j=1}^K \eta_j^\alpha (L - \sum_{j=1}^K \eta_j)^K \quad (\text{A.9})$$

führt. Mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned}
 I_K(L) &= \frac{1}{\tau^{(\alpha+1)K}} \tilde{I}_K(L) \\
 \Sigma(i) &= \sum_{j=i}^K \eta_j
 \end{aligned}$$

folgt

$$\tilde{I}_K(L) = \frac{1}{K!} \int_0^L d\eta_K \dots \int_0^{L - \Sigma(2)} d\eta_1 \prod_{j=1}^K \eta_j^\alpha (L - \Sigma(1))^K. \quad (\text{A.10})$$

Nun ist das Ergebnis der k -ten ($k \leq K$) Integration gegeben durch

$$\begin{aligned}\tilde{I}_K(L) &= \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^k}{\Gamma(K + (\alpha + 1)k + 1)} \\ &\quad \int_0^L d\eta_K \dots \prod_{j=k+2}^K \eta_j \int_0^{L-\Sigma(k+2)} d\eta_{k+1} \eta_{k+1}^\alpha (L - \Sigma(k+1))^{K+(\alpha+1)k},\end{aligned}\quad (\text{A.11})$$

was durch vollständige Induktion bewiesen wird:

1. Induktionsanfang: $k = 0$

$$\tilde{I}_K(L) = \frac{1}{\Gamma(K+1)} \int_0^L d\eta_K \dots \int_0^{L-\Sigma(2)} d\eta_1 \prod_j \eta_j^\alpha (L - \Sigma(1))^K \quad (\text{A.12})$$

2. Induktionsschritt: $k \rightarrow k + 1$

Seien also bereits k Integrationen ausgeführt, so daß nun unter Berücksichtigung der Induktionsvoraussetzung der Ausdruck

$$\begin{aligned}\tilde{I}_K(L) &= \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^k}{\Gamma(K + (\alpha + 1)k + 1)} \\ &\quad \int_0^L d\eta_K \dots \underbrace{\prod_{j=k+2}^K \eta_j \int_0^{L-\Sigma(k+2)} d\eta_{k+1} \eta_{k+1}^\alpha (L - \Sigma(k+1))^{K+(\alpha+1)k}}_{I_{in}}\end{aligned}$$

zu integrieren ist. Betrachtet wird nur das innere Integral I_{in} :

$$\begin{aligned}I_{in} &= \int_0^{L-\Sigma(k+2)} d\eta_{k+1} \eta_{k+1}^\alpha (L - \Sigma(k+1))^{K+(\alpha+1)k} \\ &= \int_0^{L-\Sigma(k+2)} d\eta_{k+1} \eta_{k+1}^\alpha ((L - \Sigma(k+2)) - \eta_{k+1})^{K+(\alpha+1)k} \\ &= (L - \Sigma(k+2))^{K+(\alpha+1)k} \int_0^{L-\Sigma(k+2)} d\eta_{k+1} \eta_{k+1}^\alpha \left(1 - \frac{\eta_{k+1}}{L - \Sigma(k+2)}\right)^{K+(\alpha+1)k} \\ &= (L - \Sigma(k+2))^{K+(\alpha+1)k+\alpha+1} \int_0^1 d\bar{\eta}_{k+1} \bar{\eta}_{k+1}^\alpha (1 - \bar{\eta}_{k+1})^{K+(\alpha+1)k}.\end{aligned}$$

Hierbei ist

$$\bar{\eta}_{k+1} = \frac{\eta_{k+1}}{L - \Sigma(k+2)}$$

und es ergibt sich mit der Integralformel (A.7)

$$I_{in} = (L - \Sigma(k+2))^{K+(\alpha+1)(k+1)} \frac{\Gamma(\alpha + 1)\Gamma(K + (\alpha + 1)k + 1)}{\Gamma(K + (\alpha + 1)(k + 1) + 1)}. \quad (\text{A.13})$$

Durch Einsetzen in (A.11) führt dies zu dem Ausdruck für $\tilde{I}_K(L)$ nach $k + 1$ ausgeführten Integrationen:

$$\begin{aligned}\tilde{I}_K(L) &= \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^{k+1}}{\Gamma(K + (\alpha + 1)(k + 1) + 1)} \\ &\quad \int_0^L d\eta_K \dots \prod_{j=k+3}^K \eta_j \int_0^{L-\Sigma(k+3)} d\eta_{k+2} \eta_{k+2}^\alpha (L - \Sigma(k + 2))^{K+(\alpha+1)(k+1)}.\end{aligned}$$

Hiermit ist die Integralformel bewiesen und soll für die Fälle $k = K - 1$ und $k = K$ angewendet werden.

$$\tilde{I}_K(L) = \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^{K-1}}{\Gamma(K + (\alpha + 1)(K - 1) + 1)} \int_0^L d\eta_K \eta_K^\alpha (L - \eta_K)^{K+(\alpha+1)(K-1)} \quad (\text{A.14})$$

Rücksubstitution liefert

$$\begin{aligned}\tilde{I}_K(L) &= \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^{K-1} \tau^{\alpha+1}}{\Gamma(K + (\alpha + 1)(K - 1) + 1)} \int_0^{\frac{L}{\tau}} d\lambda_K \lambda_K^\alpha (L - \tau \lambda_K)^{K+(\alpha+1)(K-1)} \\ &= \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^{K-1} \tau^{\alpha+1}}{\Gamma((\alpha + 2)(K - 1) + 2)} \int_0^{\frac{L}{\tau}} d\lambda_K \lambda_K^\alpha (L - \tau \lambda_K)^{(\alpha+2)(K-1)+1},\end{aligned}$$

und damit

$$I_K(L) = \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^{K-1}}{\Gamma((\alpha + 2)(K - 1) + 2)} \frac{1}{\tau^{(\alpha+1)(K-1)}} \int_0^{\frac{L}{\tau}} d\lambda_K \lambda_K^\alpha (L - \tau \lambda_K)^{(\alpha+2)(K-1)+1}. \quad (\text{A.15})$$

So lässt sich I_K^{red} direkt ablesen und I_K ist bestimmt durch

$$I_K(L) = \frac{(\Gamma(\alpha + 1))^K}{\Gamma((\alpha + 2)K + 1)} \frac{1}{\tau^{(\alpha+1)K}} L^{(\alpha+2)K}. \quad (\text{A.16})$$

Abbildungsverzeichnis

1.1	Konfiguration aus drei (Anti-) Instantonen \bar{x}_3	11
1.2	Instantongas mit $K = 14$, $\nu = 2$ im Volumen V	24
2.1	Eindimensionales Instantongas, $K = 4$	29
2.2	Ort des globalen Maximums der Verteilung $\rho(L, \lambda)$ für $\alpha = 1$, $\tau = 2$, $C = 1$ in Abhängigkeit von L	32
2.3	$\rho(2500, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation sowie Grenzverteilung $\rho(\lambda)$ für $\alpha = 1$, $\tau = 2$, $C = 1$	36
2.4	$\rho(2500, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation sowie Grenzverteilung $\rho(\lambda)$ für $\alpha = 10$, $\tau = 2$, $C = 1$	36
2.5	$\rho(L, \lambda) - \rho(\lambda)$, $L=500, 1000, 1500, 2000, 2500$, $\rho(L, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation, $\rho(\lambda)$ aus Formel (2.41), $\alpha = 1, \tau = 2, C = 1$	37
2.6	$\rho(L, \lambda) - \rho(\lambda)$, $L=500, 1000, 1500, 2000, 2500$, $\rho(L, \lambda)$ aus numerischer Aufsummation, $\rho(\lambda)$ aus Formel (2.41), $\alpha = 10, \tau = 2, C = 1$	37
3.1	$\rho(\lambda)$ für $\alpha = 1$, $\nu = 1$ aus der theoretischen Betrachtung des Kapitels 2 im Vergleich mit den Ergebnissen der entsprechenden Monte-Carlo-Simulation mit $V = L = 2000$	47
3.2	$\rho(V, \lambda)$ für $\alpha = 1$, $\nu = 2, 3, 4$, $V = 100^2, 20^3, 10^4$ aus Monte-Carlo-Simulationen	48
3.3	$\rho(V, \lambda)$ für $\alpha = 1$, $\nu = 2, 3, 4$, $V = 100^2, 20^3, 10^4$ aus Monte-Carlo-Simulationen, logarithmische Auftragung	49
3.4	$\frac{\rho(V, \lambda)}{\lambda^\alpha}$ für $\alpha = 1$, $\nu = 2, 3, 4$, $V = 100^2, 20^3, 10^4$ aus Monte-Carlo-Simulationen, logarithmische Auftragung	49
4.1	Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(2000, \lambda)$, $\nu = 1$, $\alpha = 1$, $\rho(500, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 numerisch aufsummiert; in beiden Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.	59

4.2 Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(2000, \lambda)$, $\nu = 1$, $\alpha = 1$, $\rho(500, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 numerisch aufsummiert, logarithmische Auftragung; in beiden Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.	59
4.3 Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(10^4, \lambda)$, $\nu = 4$, $\alpha = 1$, $\rho(5^4, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 mit unterschiedlicher Wahl des Parameters $b(\nu)$ numerisch aufsummiert, von oben nach unten: $b_1(4)$, $b_g(4)$, $b_2(4)$; in allen Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.	60
4.4 Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für $\rho(10^4, \lambda)$, $\nu = 4$, $\alpha = 1$, $\rho(5^4, \lambda)$ aus den analytischen Näherungen des Abschnitts 4.1 mit unterschiedlicher Wahl des Parameters $b(\nu)$ numerisch aufsummiert, von oben nach unten: $b_1(4)$, $b_g(4)$, $b_2(4)$, logarithmische Auftragung; in allen Fällen ist der thermodynamische Limes in dieser Darstellung zufriedenstellend erreicht.	61
4.5 Vergleich von Formel (4.48) mit dem entsprechenden Ergebnis der numerischen Aufsummation der Näherungen aus Abschnitt 4.1 für $\nu = 1, \dots, 4$, $\alpha = 1$, $V = 500, 20^2, 10^3, 5^4$ (von unten nach oben)	68
4.6 Instantanzahl während der Simulation für $V = 5^4, 10^4, 15^4, 20^4$ nach Erreichen des Gleichgewichtes und geeigneter Umskalierung ($\alpha = 1, C = 1$), die Messungen erfolgen im Abstand von 1000 Iterationsschritten.	69
4.7 Entwicklung der Instantanzahl nach Simulationsbeginn mit $V = 10^4, 15^4, 20^4$ nach geeigneter Umskalierung, die Messungen erfolgen im Abstand von 1000 Iterationsschritten.	69
4.8 Verteilung der Instantonradien bei Simulationen mit $V = 5^4, 10^4, 15^4, 20^4$ (von oben nach unten); um bessere Auflösung zu erzielen, wurden die Meßpunkte durch Linien verbunden.	70
4.9 Verteilung der Instantonradien bei Simulationen mit $V = 5^4, 10^4, 15^4, 20^4$ (von oben nach unten) sowie theoretische Näherung (Formel (4.48)) mit $b(4) = b_1(4), b_g(4), b_2(4)$ (von oben nach unten), logarithmische Auftragung	70
4.10 Verteilung der Instantonradien bei Simulationen mit $V = 10^4$, $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$	71
4.11 $\rho(\lambda)$ aus Formel (4.48), $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$, $b_g(4) = 2\sqrt{2}$	72
4.12 Abfall der Verteilungen jenseits der Maxima bei Simulationen mit $V = 10^4$, $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$, logarithmische Auftragung	72

4.13 Abfall von $\frac{\rho(\lambda)}{\lambda^\alpha}$ bei Simulationen mit $V = 10^4$, $\alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$, logarithmische Auftragung	73
4.14 Ergebnis des Fits an $F(\lambda) = \frac{\rho(\lambda)}{\lambda^\alpha}$ mit $\alpha = 2\frac{1}{3}$ aus einer Monte-Carlo-Simulation mit $V = 10^4$: $a = 0.85$, $b = 3.0$, $p = 2.0$, logarithmische Auftragung	74
4.15 Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für $V = 10^4$, $\alpha = 1$, $C = 10$, sowie theoretische Vorgaben aus Formel (4.48), $b(4) = b_1(4)$, $b_g(4)$, $b_2(4)$	75

Tabellenverzeichnis

4.1	Ergebnis der Fits an die Monte-Carlo-Daten mit F_{fit} für $\nu = 4, \alpha = 1, 2\frac{1}{3}, 6, 10$, Fehler ca. ± 0.1	74
4.2	Ergebnis der Fits an die Monte-Carlo-Daten mit F_{fit} für $\nu = 1, 2, 3, 4, \alpha = 1$, Fehler ca. ± 0.1	75

Literaturverzeichnis

- [1] T. Schäfer, E.V. Shuryak, *Instantons in QCD*, hep-ph/9610451 v3
- [2] S. Coleman, *Aspects of Symmetry*, Cambridge University Press, 1985
- [3] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons*, North Holland Publishing Company, 1982
- [4] A.A. Belavin, A.M. Polyakov, A.S. Schwartz, Yu.S. Tyupkin, *Pseudoparticle Solutions of the Yang-Mills Equations*, Phys.Let. **59B** (1975), 85
- [5] C.G. Callan, R.F. Dashen, D.J. Gross, *The Structure of the Gauge Theory Vacuum*, Phys.Let. **63B** (1976), 334
- [6] D.J. Gross, *A Theory of the Strong Interactions*, Phys.Rep. **49** (1979), 143
- [7] J. Madore, *Geometric Methods in classical Field Theory*, Phys.Rep. **75** (1981), 125
- [8] T. Schäfer, *Tunnelvorgänge in der Quantenchromodynamik*, Phys. Blätter, **55** (1999), Nr.9, 52
- [9] C. Wieczorkowski, *Quantenelektrodynamik und das Euklidische Pfadintegral*, Vorlesung, WWU Münster, 1998
- [10] P. Hoppe, *Tunneleffekt und Energieaufspaltung im dreidimensionalen ϕ^4 -Modell mit Pauli-Villars-Regularisierung*, Diplomarbeit, WWU Münster, 1993
- [11] L.H. Ryder, *Quantum Field Theory*, Cambridge University Press, 1996, 2nd Edition
- [12] M. Kaku, *Quantum Field Theory*, Oxford University Press, 1993
- [13] T.P. Cheng, L.F. Li, *Gauge theory of elementary particle physics*, Clarendon Press Oxford, 1991
- [14] G. Münster, *On the Statistical Mechanics of Dense Instanton Gases*, Z.Phys.C - Particles and Fields **12** (1982), 43

- [15] E.-M. Ilgenfritz, M. Mueller-Preussker, *Statistical Mechanics of the interacting Yang-Mills Instanton Gas*, Nuc.Phys.B **184** (1980), 443
- [16] T.L. Hill, *Statistical Mechanics, Principles and selected Applications*, McGraw-Hill Book Company, 1956
- [17] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, *Grundlagen der Statistischen Physik*, de Gruyter, 1994
- [18] Bronstein, Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner Verlagsgesellschaft, 1991
- [19] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, *Equation of State Calculations by fast Computing Machines*, J.Chem.Phys. **21** (1953), 1087
- [20] D. Chandler, *Introduction to modern Statistical Mechanics*, Oxford University Press, 1987
- [21] A.D. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms*, Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, Lausanne, 1989
- [22] M. Hasenbusch, *Monte Carlo Simulationen in der Statistischen Physik*, Vorlesungsskript
- [23] D.W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Springer Verlag, 1990, 2nd Edition
- [24] K. Binder, D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer Verlag, 1992
- [25] J.A. Barker, D. Henderson, *What is “liquid”? Understanding the states of matter*, Rev.Mod.Phys. **48** (1976), 587
- [26] J.P. Valleau, L.K. Cohen, *Primitive model electrolytes. I. Grand canonical Monte Carlo computations*, J.Chem.Phys. **72** (1980), 5935
- [27] D.J. Adams, *Chemical potential of hard-sphere fluids by Monte Carlo Methods*, Mol.Phys. **28** (1974), 1241
- [28] D.J. Adams, *Grand canonical ensemble Monte Carlo for Lennard-Jones fluid*, Mol.Phys. **29** (1975), 307
- [29] W. van Megen, I.K. Snook, *The grand canonical ensemble Monte Carlo method applied to electrolyte solutions*, Mol.Phys. **39** (1980), 1043

- [30] L.S. Ornstein, Dissertation, Leiden 1908 zitiert in G.E. Uhlenbeck, Brandeis Lectures vol.3, 1962
- [31] F. Reif, *Physikalische Statistik und Physik der Wärme*, de Gruyter, 1976
- [32] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, R. Oldenbourg Verlag, 1983
- [33] L. Boltzmann, *Über die Zustandsgleichung van der Waals in Wissenschaftliche Abhandlungen, Band III*, 1882-1905
- [34] L.A. Rowley, D. Nicholson, N.G. Personage, *Monte Carlo Grand Canonical Ensemble Calculation in a Gas-Liquid Transition Region for 12-6 Argon*, J. of Comp.Phys. **17** (1975), 401
- [35] J. Yao, *Monte Carlo simulation of the grand canonical ensemble*, Mol.Phys. **46** (1982), 587
- [36] E. Marinari, *Optimized Monte Carlo Methods*, Lectures at the Budapest Summer School on Monte Carlo Methods, 1996, cond-mat/9612010
- [37] K. Hukushima, K. Nemoto, *Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations*, 1995, cond-mat/9512035

Schlußwort

An dieser Stelle möchte ich mich bei vielen Menschen bedanken, die zum Gelingen meines Studiums in Münster beigetragen haben und deren Unterstützung auch bei der Anfertigung dieser Diplomarbeit nicht unerwähnt bleiben soll.

In beliebiger Reihenfolge gilt mein Dank

- meiner Familie und insbesondere meinen Eltern, deren Hilfe ich mir jederzeit sicher sein konnte,
- Prof. Dr. G. Münster für die vielseitige und interessante Aufgabenstellung sowie die Betreuung meiner Arbeit, aber auch Dr. K. Pinn für seine Anregungen und Hilfsbereitschaft,
- meinen Zimmerkollegen sowie den Mitgliedern der weiter gefaßten Arbeitsgruppe für die sehr gute Atmosphäre. Es ließ sich immer ein offenes Ohr für Fragen und Diskussionen finden; aber ebensowenig fehlte die Zeit für manchen Tee, Cappuccino oder ein Eis in der Sonne.
- Barbara Saul, Andrea Plagge, Jens Fischer, Ulrich von Poblotzki, Barbara Haverkamp und Maria Kamp für das Korrekturlesen meiner Arbeit. Durch diese aktive und oft spontane Hilfe konnte ich einiges dazulernen.
- zahlreichen Menschen aus Münster und der Zeit in Hamburg. Viele sind mir zu Freunden geworden und ich verdanke ihnen allen eine sehr gute Zeit.
- ganz besonders denen, die Erwähnung verdient hätten, aber meiner Unaufmerksamkeit zum Opfer fielen.

Hiermit versichere ich, die vorliegende Diplomarbeit selbständig angefertigt und
keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet zu haben.

Münster, im September 1999

