

Masterarbeit

Bestimmung von Massen in der
supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie mit
der Variationsmethode

Determination of masses in supersymmetric Yang-Mills theory
using the variational method

Simon Kuberski

Betreuer: Prof. Dr. Gernot Münster
Zweitgutachter: PD Dr. Jochen Heitger

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich aufgrund der Korrektur von Tippfehlern geringfügig von der dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

Abstract

The $\mathcal{N} = 1$ supersymmetric Yang-Mills theory is the supersymmetric extension of the gluonic sector of the Standard Model of particle physics, as it describes the symmetry between gluons and their superpartners, the gluinos. In the low energy region supermultiplets containing one scalar, one pseudoscalar and one fermionic particle are expected to form. Monte-Carlo methods on the lattice can be used to examine the non-perturbative dynamics of the theory. In this thesis the variational method together with smearing techniques is used to determine the masses of different states of the gluino-gluonball, the fermionic particle in the supermultiplets.

Zusammenfassung

Die $\mathcal{N} = 1$ supersymmetrische Yang-Mills-Theorie ist die supersymmetrische Erweiterung des gluonischen Sektors des Standardmodells der Teilchenphysik. Sie beschreibt die Wechselwirkung zwischen Gluonen und ihren Superpartnern, den Gluinos. Im niederenergetischen Bereich wird die Bildung von Supermultipletts erwartet, welche jeweils ein skalares, ein pseudoskalares und ein fermionisches Teilchen enthalten. Mittels Monte-Carlo-Methoden auf dem Gitter ist es möglich, die nichtperturbative Dynamik der Theorie zu untersuchen. In dieser Arbeit wird die Variationsmethode zusammen mit sogenannten Smearing-Techniken verwendet, um die Massen verschiedener Zustände des Gluino-Gluonballes, des Fermions in den Supermultipletts, zu bestimmen.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Feldtheorien auf dem Gitter	3
2.1. Euklidische Feldtheorie	3
2.2. Gitterdiskretisierung	4
2.3. Eichtheorien auf dem Gitter	6
2.4. Fermionen auf dem Gitter	9
3. Supersymmetrische Yang-Mills-Theorie	14
3.1. Poincaré-Superalgebra	14
3.2. SUSY-Teilchen	15
3.3. Superfelder	17
3.4. Supersymmetrische Lagrangedichten	19
3.5. $\mathcal{N} = 1$ supersymmetrische Yang-Mills-Theorie	19
3.6. SYM-Massenmultipletts	20
3.7. Gitterdiskretisierung der $\mathcal{N} = 1$ SYM	21
3.8. Diskretisierungseffekte	23
3.9. Verbesserung der Wirkung	24
3.10. Korrelator des Gluino-Glueballes	25
4. Numerische Methoden	28
4.1. Markow-Ketten	29
4.2. Metropolis-Algorithmus	30
4.3. Korrelatoren und Massenbestimmung	31
4.4. Smearing	34
4.4.1. APE Smearing	34
4.4.2. Jacobi-Smearing	35
4.5. Variationsmethode	36
4.5.1. Numerische Lösung der Eigenwertprobleme	40
4.6. Fehleranalyse	41
4.6.1. Autokorrelation	42
4.6.2. Binning	44
4.6.3. Jackknife-Verfahren	45

5. Massenbestimmung des Gluino-Glueballes	48
5.1. Einfluss und Optimierung des verwendeten Smearings	48
5.2. Massenfits	55
5.2.1. Automatisierte Massenbestimmung	55
5.3. Fehlerabschätzung und Autokorrelation	58
5.4. Resultate für $\beta = 1,9$	60
5.4.1. Korrelator C_1	61
5.4.2. Korrelator C_{γ_4}	64
5.5. Finale Massenbestimmung	68
5.6. Verschiedene Versionen der Variationsmethode	70
6. Zusammenfassung und Ausblick	72
A. Notation	76
A.1. Pauli-Matrizen	76
A.2. Dirac-Matrizen	77
B. Nichtabelsche Eichtheorien	78
C. Graßmann-Algebra	80

1. Einleitung

Das Standardmodell der Teilchenphysik beschreibt die Elementarteilchen, aus welchen die uns umgebende Materie aufgebaut ist, sowie die Wechselwirkungen zwischen ihnen. Sein großer Erfolg liegt darin, dass es mathematisch in sich geschlossen und gleichzeitig durch viele Experimente auf unterschiedlichsten Skalen und mit großer Genauigkeit überprüft worden ist. Trotzdem lässt auch das Standardmodell viele Fragen offen. So ist ein Feintuning von 19 freien Parametern notwendig, um das Modell den experimentellen Beobachtungen anzupassen. Wenn zusätzlich massive Neutrinos betrachtet werden, erhöht sich diese Zahl auf 27 freie Parameter [1]. Dies ist insofern unbefriedigend, als dass innerhalb des Standardmodells keine Erklärung dafür gegeben werden kann, warum diese Parameter genau die Werte annehmen sollten, die zur theoretischen Vorhersage der experimentellen Ergebnisse notwendig sind [2]. Auch die Struktur der Teilchen innerhalb des Standardmodells in drei Familien aus Quarks und Leptonen und der über viele Größenordnungen gehende Massenunterschied zwischen den Elementarteilchen ist nicht erklärbar. Weitere Probleme sind das mit der Higgsmasse verknüpfte Hierarchieproblem [3] oder die Zusammensetzung der Dunklen Materie [4], von welcher auf Grundlage kosmologischer Beobachtungen angenommen wird, dass sie etwa 23% der Energiedichte des Universums ausmacht, im Gegensatz zur sichtbaren Materie, deren Anteil nur bei etwa 5% liegt. Für die Lösung dieser Probleme wird eine Theorie für Physik jenseits des Standardmodells benötigt.

Eine mögliche Erweiterung des Standardmodells ist die Supersymmetrie (SUSY), welche eine Verallgemeinerung der Raumzeit-Symmetrien der Quantenfeldtheorie darstellt und Bosonen und Fermionen ineinander überführt [2]. In dieser Theorie bekommt jedes Teilchen des Standardmodells mindestens einen Superpartner, welcher dieselben Quantenzahlen besitzt, mit Ausnahme des um $1/2$ verschiedenen Spins. Durch die Einführung dieser Superpartner und der Symmetrie zwischen Bosonen und Fermionen ist es möglich das Hierarchieproblem zu lösen. Des Weiteren liefern supersymmetrische Teilchen Kandidaten für Dunkle Materie. Gleichzeitig ermöglicht die Supersymmetrie die Vereinheitlichung der Eichsymmetrien des Standardmodells zur sogenannten *Grand Unified Theory*. Da die Superpartner bei ungebrochener Supersymmetrie dieselbe Masse wie ihre Partner aus dem Standardmodell besäßen, wären sie bereits experimentell gefunden worden. Wenn es eine Supersymmetrie gibt, ist sie also gebrochen [5]. Dennoch kann SUSY weiterhin einige der oben beschriebene Probleme lösen, wenn sie lediglich weich gebrochen

ist. Diese Brechung führt zu weiteren unbekanntem Parametern, nämlich den Massen der Superpartner. In den zur Zeit zugänglichen Energiebereichen wurde bisher noch keiner dieser Superpartner gefunden [6].

Supersymmetrische Erweiterungen des Standardmodells wie das *Minimal Supersymmetric Standard Model* (MSSM), welche auf weich gebrochenen supersymmetrischen Theorien basieren, werden für gewöhnlich mittels störungstheoretischer Methoden untersucht und mit experimentellen Ergebnissen verknüpft [7]. Hier wird angenommen, dass diese Modelle effektive Theorien einer auf großen Energieskalen erhaltenen Symmetrie sind. Nichtperturbative Methoden ermöglichen die Vorhersage der Parameter einer solchen stark gekoppelten Theorie, ähnlich wie dies auch für die Quantenchromodynamik (QCD) möglich ist. Dennoch ist die Simulation einer vollen supersymmetrischen Erweiterung des Standardmodells mit heutigen Techniken noch nicht möglich. Ein erster Baustein einer solchen Theorie ist die supersymmetrische Erweiterung des gluonischen Sektors des Standardmodells, die supersymmetrische Yang-Mills-Theorie (SYM). Wichtige Eigenschaften einer vollständigen Erweiterung sind die spontane Brechung der chiralen Symmetrie und Confinement. Diese sind auch Bestandteile der supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie. Durch Confinement werden farblose, gebundene Zustände erwartet, welche in supersymmetrischen Multipletts angeordnet sind. Die Anordnung dieser gebundenen Zustände in den Supermultipletts kann durch die Konstruktion einer effektiven Wirkung vorhergesagt werden [8, 9, 10]. Das Ziel dieser Arbeit ist die Massenbestimmung für gebundene Zustände der $\mathcal{N} = 1$ supersymmetrischen SU(2) Yang-Mills-Theorie, um so die Erkenntnisse über die Supermultipletts zu erweitern.

In Kapitel 2 erfolgt eine Einführung in Feldtheorien auf dem Gitter. Dabei werden zunächst die allgemeinen Techniken, um Bosonen und Fermionen auf dem Gitter zu beschreiben, hergeleitet. Die Anwendung auf die supersymmetrische Yang-Mills-Theorie erfolgt dann in Kapitel 3, nachdem eine kurze Zusammenfassung der Eigenschaften und der mathematischen Struktur supersymmetrischer Theorien erfolgt ist. In Kapitel 4 werden die technischen Aspekte der Gittersimulationen wie die Techniken zur Massenbestimmung die Behandlung von statistischen Fehlern beschrieben. Auf Grundlage dieser Vorüberlegungen erfolgt in Kapitel 5 die Auswertung der durchgeführten Messungen. Dabei wird die Masse des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes des Gluino-Glueballes für verschiedene Werte der Gluinomasse bestimmt. Mittels dieser Ergebnisse erfolgt ein Vergleich mit den bereits bekannten Massen anderer gebundener Zustände und der Vergleich mit den vorhergesagten Multipletts. Im Anschluss erfolgt in Kapitel 6 eine Zusammenfassung der Ergebnisse und ein Ausblick auf weitere Fragestellungen im Zusammenhang mit der supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie.

2. Feldtheorien auf dem Gitter

Die nachfolgende Einführung in Feldtheorien auf dem Gitter orientiert sich zu großen Teilen an [11] und [12], sowie [13], [14] und [15]. Die Formulierung einer Quantenfeldtheorie auf dem Gitter wird durch Feynmans Pfadintegralformalismus und die Einführung der euklidischen Metrik ermöglicht. Eine Einführung findet sich beispielsweise in [16].

2.1. Euklidische Feldtheorie

Der Pfadintegralformalismus lässt sich zur Formulierung der euklidischen Feldtheorie verwenden. Dabei wird zunächst ein Lorentz-Skalarfeld $\phi(x)$ betrachtet, in dem $x = (\vec{x}, t)$ die Raumzeitkoordinate angibt und die zeitliche Entwicklung des Feldes durch

$$\phi(\vec{x}, t) = e^{iHt} \phi(\vec{x}, t = 0) e^{-iHt} \quad (2.1)$$

gegeben ist. Von besonderer Bedeutung in der Feldtheorie sind die Vakuumerwartungswerte zeitgeordneter Produkte von Feldoperatoren, die Greensfunktionen G . Diese können als Funktionalintegrale wie folgt dargestellt werden:

$$G(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle 0 | T \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) e^{iS}, \quad (2.2)$$

mit

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{iS} \quad (2.3)$$

und dem Zeitordnungsoperator T . Um ein reelles Integral zu erhalten und stark oszillierende Beiträge zu unterdrücken, erfolgt die Wickrotation zur euklidischen Zeit τ über

$$t = -i\tau, \quad \tau > 0. \quad (2.4)$$

Damit erfolgt gleichzeitig der Übergang von der Minkowski-Metrik

$$ds^2 = -dt^2 + dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 \quad (2.5)$$

zur vierdimensionalen euklidischen Metrik

$$ds^2 = d\tau^2 + dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2. \quad (2.6)$$

Mit diesem Übergang zu imaginären Zeiten τ erhält man die sogenannten Schwingerfunktionen oder euklidischen Greensfunktionen

$$G_E(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \dots \phi(x_n) e^{-S_E} \quad (2.7)$$

mit

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E}. \quad (2.8)$$

Dabei folgt für ein Skalarfeld mit der Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_\mu \phi)(\partial^\mu \phi) - \frac{m^2}{2}\phi(x)^2 - \frac{g}{4!}\phi(x)^4, \quad (2.9)$$

mit der Masse m und der Kopplungskonstanten g die euklidische Wirkung

$$S_E = -iS|_{t=-i\tau} = \int d^4x \left(\frac{1}{2}(\partial_\mu \phi)^2 + \frac{m^2}{2}\phi^2 + \frac{g}{4!}\phi^4 \right), \quad (2.10)$$

welche dann bei der Berechnung der euklidischen Greensfunktionen verwendet wird.

2.2. Gitterdiskretisierung

Der nächste Schritt zur Betrachtung der Feldtheorie auf dem Gitter ist die Diskretisierung der euklidischen Raumzeit. Diese Gitterdiskretisierung auf einem endlichen Gitter ermöglicht die numerische Auswertung der Theorie auf dem Computer. Die Auswertung erfolgt anhand diskretisierter Operatoren, welche im Kontinuumsimes mit den Operatoren im Kontinuum übereinstimmen. Die Zeitkomponente τ wird per Konvention und zur Abgrenzung zur Minkowski-Metrik mit x_4 bezeichnet, so dass sich für das Skalarprodukt im euklidischen Raum

$$x \cdot y = x_1y_1 + y_2y_2 + x_3y_3 + x_4y_4 \quad (2.11)$$

ergibt. Die kovarianten und kontravarianten Elemente eines euklidischen Vektors sind identisch, $x_\mu = x^\mu$ mit $\mu = 1,2,3,4$. Zur Diskretisierung dieser Raumzeit wird ein hyper-

kubisches Gitter

$$\Lambda = a\mathbb{Z}^4 = \left\{ x \left| \frac{x_\mu}{a} \in \mathbb{Z} \right. \right\} \quad (2.12)$$

mit der Gitterkonstante a eingeführt. Das Skalarfeld $\phi(x)$ ist nun nur noch auf den Gitterpunkten $x \in \Lambda$ definiert. Partielle Ableitungen werden auf dem Gitter durch finite Differenzen ersetzt, wobei zwischen verschiedenen Varianten, wie der Vorwärtsableitung

$$\Delta_\mu^f \phi(x) = \frac{1}{a}(\phi(x + \hat{\mu}) - \phi(x)) \quad (2.13)$$

und der Rückwärtsableitung

$$\Delta_\mu^b \phi(x) = \frac{1}{a}(\phi(x) - \phi(x - \hat{\mu})) \quad (2.14)$$

mit dem Fehler $\mathcal{O}(a)$ im Vergleich zur analytischen Ableitung oder der zentralen Ableitung

$$\Delta_\mu^c \phi(x) = \frac{1}{2a}(\phi(x + \hat{\mu}) - \phi(x - \hat{\mu})) \quad (2.15)$$

mit dem Fehler $\mathcal{O}(a^2)$ unterschieden werden kann. $\hat{\mu}$ ist hier der Einheitsvektor in μ -Richtung. Der d'Alembertoperator auf dem Gitter kann durch

$$\square \phi(x) = -\Delta_\mu^b \Delta_\mu^f \phi(x) = \sum_{\mu=1}^4 \frac{1}{a^2} (2\phi(x) - \phi(x + \hat{\mu}) - \phi(x - \hat{\mu})) \quad (2.16)$$

definiert werden. Raumzeit-Integrale werden bei der Diskretisierung durch Summen ersetzt

$$\int d^4x \longrightarrow \sum_{x \in \Lambda} a^4, \quad (2.17)$$

sodass das Integrationsmaß des Funktionalintegrals lediglich die Gitterpunkte $x \in \Lambda$ enthält,

$$\mathcal{D}\phi = \prod_{x \in \Lambda} d\phi(x). \quad (2.18)$$

Für endliche Gitter enthält das Funktionalintegral also nur eine endliche Anzahl an Integralen. Bei der Definition eines endlichen Gitters wird meist zwischen der Gitterlänge $L_1 = L_2 = L_3 \equiv L$ in die Raumrichtungen und der Länge $L_4 \equiv T$ in die Richtung der

euklidischen Zeit unterschieden, sodass das Volumen des Gitters $V = L^3 \times T$ beträgt und das Gitter die Gitterpunkte

$$x_\mu = an_\mu \quad \text{mit} \quad n_\mu = 0, 1, 2, \dots, L_\mu - 1 \quad (2.19)$$

enthält. Für die Ränder des Gitters werden meist periodische oder antiperiodische Randbedingungen gewählt

$$\phi(x) = \phi(x + L_\mu \hat{\mu}) \quad \text{bzw.} \quad \phi(x) = -\phi(x + L_\mu \hat{\mu}). \quad (2.20)$$

Durch die Diskretisierung sind Impulse auf dem Gitter auf die erste Brillouin-Zone

$$-\frac{\pi}{a} < p_\mu \leq \frac{\pi}{a} \quad (2.21)$$

beschränkt. Dadurch wird ein ultravioletter Cutoff $|p_\mu| \leq \frac{\pi}{a}$ eingeführt, der dafür sorgt, dass Feldtheorien auf dem Gitter automatisch regularisiert sind.

2.3. Eichtheorien auf dem Gitter

In diesem Kapitel werden Eichfelder auf dem Gitter betrachtet, eine Einführung in die Eichtheorien im Kontinuum findet sich in Anhang B. Die Forderung einer Invarianz unter lokalen Eichtransformationen führt zur Einführung von Eichfeldern. Die Form, mit der diese auf dem Gitter eingeführt werden, kann aus der Invarianzforderung abgeleitet werden. Bei einer Rotation unter $SU(N)$ transformiert sich das Feld gemäß

$$\phi \rightarrow \phi' = \Omega(x)\phi(x) \quad \text{mit} \quad \Omega(x) \in SU(N). \quad (2.22)$$

Produkte $\bar{\phi}\phi$ der Felder am selben Raumzeitpunkt sind somit eichinvariant. Im Kontinuum werden kinetische Terme in der Wirkung durch die Einführung der kovarianten Ableitung eichinvariant. Die diskretisierten Ableitungen in (2.13)–(2.15) enthalten jedoch Felder an benachbarten Gitterpunkten, was dazu führt, dass kinetische Terme nicht mehr eichinvariant sind:

$$\bar{\phi}(x)\phi(x + \hat{\mu}) \rightarrow \bar{\phi}'(x)\phi'(x + \hat{\mu}) = \bar{\phi}(x)\Omega^\dagger(x)\Omega(x + \hat{\mu})\phi(x + \hat{\mu}). \quad (2.23)$$

Wenn in das Produkt ein weiteres Feld $U_\mu(x)$ in der Form

$$\bar{\phi}'(x)U'_\mu(x)\phi'(x + \hat{\mu}) = \bar{\phi}(x)\Omega^\dagger(x)U'_\mu(x)\Omega(x + \hat{\mu})\phi(x + \hat{\mu}) \quad (2.24)$$


 Abbildung 2.1.: Linkvariablen $U_\mu(x)$ und $U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu})$.

eingefügt wird, wird dieses Produkt eichinvariant, wenn das neue Feld gemäß

$$U_\mu(x) \rightarrow U'_\mu(x) = \Omega(x)U_\mu(x)\Omega^\dagger(x + \hat{\mu}) \quad (2.25)$$

transformiert. Dieses Feld mit Startpunkt x und Richtung $\hat{\mu}$ wird im Gitter auf die Verbindung der Gitterpunkte x und $x + \hat{\mu}$ gesetzt. Die Orientierung dieser sogenannten Linkvariable $U_\mu(x)$ kann auch in negative Richtung zeigen, hier gilt

$$U_{-\mu}(x) = U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu}). \quad (2.26)$$

Beide Linkvariablen sind in Abbildung 2.1 gezeigt. Die Entsprechungen dieser Linkvariablen im Kontinuum sind die Paralleltransporter, welche zum Beispiel in [17] ausführlich eingeführt werden.

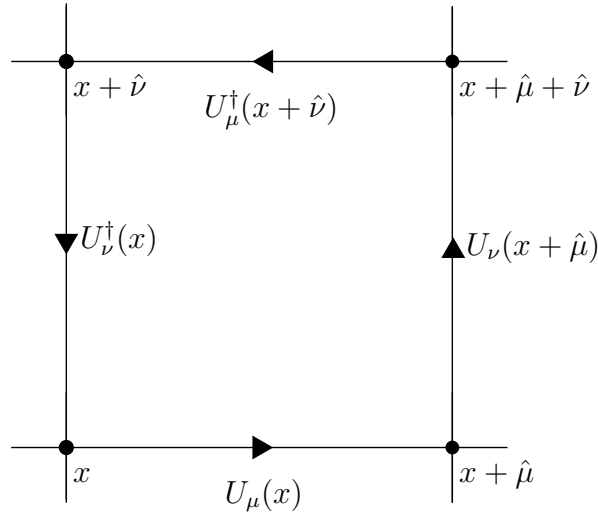


Abbildung 2.2.: Plakette.

Die Spur über eine geschlossene Schleife aus Linkvariablen ist ein eichinvariantes Objekt [11]. Das kleinste dieser Objekte ist die sogenannte Plakette $U_{\mu\nu}(x)$, welche aus vier Links aufgebaut ist:

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(x) &= U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_{-\mu}(x + \hat{\mu} + \hat{\nu})U_{-\nu}(x + \hat{\nu}) \\ &= U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Diese in Abbildung 2.2 gezeigte Plakette wurde von Wilson [18] genutzt, um mit der Wilson-Wirkung S_W eine Yang-Mills-Wirkung S_{YM} auf dem Gitter zu konstruieren. Dazu wird über alle Plaketten summiert, wobei jede Plakette lediglich in einer Umlaufrichtung berücksichtigt wird. Die Wirkung kann dann durch

$$S_W = \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \beta \left(1 - \frac{1}{N} \text{ReTr}[U_{\mu\nu}(x)] \right) \quad \text{für } \text{SU}(N) \quad (2.28)$$

dargestellt werden. Diese einfache Wirkung ist eichinvariant, reell und positiv. Wenn die Linkvariable durch

$$U_\mu(x) = \exp(-aA_\mu(x)) \quad (2.29)$$

mit dem Vektorfeld

$$A_\mu(x) = -igA_\mu^b(x)T_b \quad (2.30)$$

definiert wird, so führt die Entwicklung der Wilson-Wirkung für kleine Gitterkonstanten a auf die Form

$$S_W \cong -\frac{\beta}{4N} \sum_x a^4 \text{Tr}[F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)] + \mathcal{O}(a^5), \quad (2.31)$$

welche mit der Ersetzung

$$\beta = \frac{2N}{g^2} \quad (2.32)$$

im Kontinuum zur Yang-Mills-Wirkung

$$S_{\text{YM}} = \int d^4x \left(-\frac{1}{2} \text{Tr}[F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)] \right) \quad (2.33)$$

übergeht. Der Erwartungswert einer Größe O kann nun mit Hilfe des Funktionalintegrals und der Wilson-Wirkung bestimmt werden und ist durch

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U O e^{-S_W[U]} \quad (2.34)$$

mit

$$\int \mathcal{D}U = \prod_{x \in \Lambda} \prod_{\mu=1}^4 \int dU_\mu(x) \quad (2.35)$$

und

$$Z = \int \mathcal{D}U e^{-S_W[U]} \quad (2.36)$$

gegeben. Damit das Pfadintegral wie die Wirkung invariant unter Eichtransformationen ist, muss auch das Integrationsmaß invariant sein. Dies ist gegeben, wenn das Haarsche Maß auf der Eichgruppe verwendet wird [11]. Dieses erfüllt auf der Gruppe G für eine Funktion f die Eigenschaften der Invarianz

$$\int_G f(U) dU = \int_G f(\Omega U) dU = \int_G f(U \Omega) dU \quad \text{für alle } \Omega \in G \quad (2.37)$$

und der Normierung

$$\int_G dU = 1. \quad (2.38)$$

Ein weiteres eichinvariantes Objekt aus Linkvariablen ist die Wilson-Schleife, welche später für die Verbesserung der Eichwirkung verwendet wird. Eine Wilson-Schleife \mathcal{W}_L besteht aus zwei räumlichen Wilson-Linien $S(\vec{x}, \vec{y}, 0)$, $S(\vec{x}, \vec{y}, t)$ und zwei zeitlichen Transportern $T(\vec{x}, t)$, $T(\vec{y}, t)$. Die räumliche Wilson-Linie $S(\vec{x}, \vec{y}, t)$ verbindet die Punkte \vec{x} und \vec{y} entlang eines Pfades $\mathcal{C}_{\vec{x}, \vec{y}}$ zum festen Zeitpunkt t , während der zeitliche Transporter $T(\vec{x}, t)$ aus einem Produkt aus aufeinanderfolgenden Linkvariablen besteht, welche sich auf der räumlichen Koordinate \vec{x} befinden. Die Verbindung dieser vier Elemente ergibt eine geschlossene Schleife L . Die Spur über diese Schleife ist die eichinvariante Wilson-Schleife:

$$\mathcal{W}_L = \text{Tr}[S(\vec{x}, \vec{y}, t) T^\dagger(\vec{y}, t) S^\dagger(\vec{x}, \vec{y}, 0) T(\vec{x}, t)] = \text{Tr} \left[\prod_{(w, \mu) \in L} U_\mu(w) \right]. \quad (2.39)$$

2.4. Fermionen auf dem Gitter

Im Gegensatz zu den oben eingeführten Skalarfeldern $\phi(x)$, die für gleiche Zeiten $x^0 = y^0$ kommutieren, also

$$[\phi(x), \phi(y)] = \phi(x)\phi(y) - \phi(y)\phi(x) = 0 \quad (2.40)$$

erfüllen, müssen fermionische Felder $\psi(x)$ antikommutieren, um Teilchen zu repräsentieren, die der Fermi-Dirac-Statistik gehorchen. Es muss also

$$\{\psi(x), \psi(y)\} = \psi(x)\psi(y) + \psi(y)\psi(x) = 0 \quad (2.41)$$

gelten. Diese Eigenschaft ist erfüllt, wenn die Fermionfelder durch Grassmannvariablen dargestellt werden (siehe Anhang C). Mit dem fermionischen Pfadintegral mit dem Integrationsmaß

$$\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} = \prod_x \prod_\alpha d\psi_\alpha(x) d\bar{\psi}_\alpha(x) \quad (2.42)$$

lässt sich der Vakuumerwartungswert einer Größe O durch

$$\langle 0|O|0\rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} O e^{-S_f} \quad (2.43)$$

ausdrücken, wobei S_f die fermionische Wirkung ist. Im Falle eines freien Diracfeldes gilt für diese Wirkung mit den in Anhang A.2 definierten Dirac-Matrizen γ_μ

$$S_f = \int d^4x \bar{\psi}(x)(\gamma_\mu \partial^\mu + m)\psi(x). \quad (2.44)$$

Wenn die fermionischen Felder bilinear in der Wirkung auftreten, kann das Gaußintegral, wie es in (C.15) eingeführt ist, verwendet werden, um das Pfadintegral auf dem Gitter zu

$$\int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} e^{-S_f} = \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} e^{-\bar{\psi}_x Q_{xy} \psi_y} = \det Q \quad (2.45)$$

zu lösen. Dabei wird Q als Fermionmatrix und $\det Q$ als Fermiondeterminante bezeichnet. Der analytisch schwierige Teil liegt hier also nicht in der Integration, sondern in der Auswertung der Determinante der Matrix Q , welche bereits bei kleinen endlichen Gittern sehr groß ist.

Die eichinvariante, diskretisierte, „naive“ Gitterversion der fermionischen Wirkung ist

$$S_f = a^4 \sum_x \bar{\psi}(x) \left(\sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \frac{U_\mu(x)\psi(x + \hat{\mu}) - U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu})\psi(x - \hat{\mu})}{2a} + m\psi(x) \right). \quad (2.46)$$

Da diese Wirkung bilinear in $\bar{\psi}$ und ψ ist, kann sie in der Form

$$S_f = a^4 \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D(x,y) \psi(y) \quad (2.47)$$

mit dem diskretisierten Diracoperator

$$D(x,y) = \sum_{\mu=1}^4 \gamma_{\mu} \frac{U_{\mu}(x)\delta_{x+\hat{\mu},y} - U_{\mu}^{\dagger}(x-\hat{\mu})\delta_{x-\hat{\mu},y}}{2a} + m\delta_{x,y} \quad (2.48)$$

geschrieben werden. Diese Form des Diracoperators birgt Probleme, die deutlich werden, wenn der Operator fouriertransformiert wird, um den Fermionpropagator zu bestimmen. Dazu wird in beiden Raumzeitkoordinaten transformiert und $U_{\mu}(x) = 1$ für alle x und μ gewählt. Damit lässt sich die Größe

$$\begin{aligned} \tilde{D}(p,q) &= \frac{1}{L} \sum_{x,y} e^{-ip \cdot xa} D(x,y) e^{iq \cdot ya} \\ &= \frac{1}{L} \sum_x e^{-i(p-q) \cdot xa} \left(\sum_{\mu=1}^4 \frac{e^{iq_{\mu}a} - e^{-iq_{\mu}a}}{2a} + m\mathbf{1} \right) = \delta(p-q) \tilde{D}(p) \end{aligned} \quad (2.49)$$

erhalten. Dieser diskret fouriertransformierte Diracoperator kann durch

$$\tilde{D}(p) = m\mathbf{1} + \frac{i}{a} \sum_{\mu=1}^4 \gamma_{\mu} \sin(p_{\mu}a) \quad (2.50)$$

dargestellt werden. Der Propagator wird nun durch das Invertieren des fouriertransformierten Operators erhalten,

$$\tilde{D}^{-1}(p) = \frac{m\mathbf{1} + ia^{-1} \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \sin(p_{\mu}a)}{m^2 + a^{-2} \sum_{\mu} \sin^2(p_{\mu}a)}. \quad (2.51)$$

Im Falle masseloser Fermionen ($m = 0$) hat dieser nicht nur einen Pol bei

$$p = (0; 0; 0; 0),$$

sondern weitere für alle Viererimpulse, bei denen die Komponenten $p_{\mu} \in \{0, \pi/a\}$ erfüllen. Damit ergeben sich für Impulse in der Brillouinzone mit $p_{\mu} \in (-\pi/a; \pi/a]$ insgesamt 15 weitere unphysikalische Pole, die sogenannten Fermiondoppler. Nielsen und Ninomiya [19, 20] haben gezeigt, dass eine freie, chirale invariante fermionische Gitterwirkung, welche lokal, translationsinvariant und reell ist, notwendigerweise Fermiondoppler enthält.

Um Fermiondoppler zu vermeiden, muss also eine der obigen Eigenschaften der Gitterwirkung gebrochen werden. Ein Weg, dies zu tun, ist die explizite Verletzung der chiralen Invarianz durch das Hinzufügen des sogenannten Wilson-Terms zur Wirkung. Durch diesen Term erhalten die unphysikalischen Fermionen eine Masse, während das

physikalische Fermion masselos bleibt. Der Diracoperator im Impulsraum wird zu

$$\tilde{D}(p) = m\mathbf{1} + \frac{i}{a} \sum_{\mu=1}^4 \gamma_{\mu} \sin(p_{\mu}a) + \mathbf{1} \frac{1}{a} \sum_{\mu=1}^4 (1 - \cos(p_{\mu}a)) \quad (2.52)$$

verändert. Der zusätzliche Term verschwindet für alle Komponenten, für die $p_{\mu} = 0$ gilt, während für alle Komponenten mit $p_{\mu} = \pi/a$ ein Beitrag $2/a$ addiert wird. Damit erhalten alle Doppler die Gesamtmasse

$$m + \frac{2l}{a},$$

wobei l die Anzahl an Komponenten mit $p_{\mu} = \pi/a$ ist. Im Limes $a \rightarrow 0$ steigt die Masse der Doppler stark an und diese entkoppeln vom niederenergetischen Bereich der Theorie. Lediglich der physikalische Pol des Propagators $\tilde{D}^{-1}(p)$ bleibt bestehen. Die fermionische Wirkung wird durch die Einführung des Wilson-Terms zu

$$S_f = a^4 \sum_x \left\{ \left(m + \frac{4}{a} \right) \bar{\psi}(x)\psi(x) - \frac{1}{2a} \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} \bar{\psi}(x)(1 + \gamma_{\mu})U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu})\psi(x - \hat{\mu}) \right\} \quad (2.53)$$

verändert. Die Summation erfolgt hier in negativer und positiver Richtung.

Diese Wirkung kann mit der Einführung des Hoppingparameters κ mit

$$\kappa \equiv \frac{1}{2am + 8}, \quad (2.54)$$

welcher für große Massen klein wird, auf eine andere Art und Weise dargestellt werden. Dafür werden die Felder in der Form

$$a^{3/2}(am + 4)^{1/2}\psi(x) \rightarrow \psi(x), \quad a^{3/2}(am + 4)^{1/2}\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) \quad (2.55)$$

reskaliert. Mit der Kurzschreibweise $\sum_{\mu} = \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4}$ kann die Wirkung dann durch

$$S_f = \sum_x \left\{ \bar{\psi}(x)\psi(x) - \kappa \sum_{\mu} \bar{\psi}(x)(1 + \gamma_{\mu})U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu})\psi(x - \hat{\mu}) \right\} \equiv \sum_{x,y} \bar{\psi}_x Q_{xy} \psi_y \quad (2.56)$$

dargestellt werden. Auf der rechten Seite ist die Wirkung als Produkt der Fermionfelder mit der Fermionmatrix gezeigt, die Matrixelemente sind damit durch

$$Q_{xy} = \delta_{xy} - \kappa \sum_{\mu} \delta_{x,y-\hat{\mu}}(1 + \gamma_{\mu})U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu}) \quad (2.57)$$

gegeben. Diese Form der Fermionmatrix wird auch als Dirac-Wilson-Operator bezeichnet. Um die Zweipunktfunktion zu berechnen, können nun die bereits gezeigten Techniken für Pfadintegrale, die oben hergeleiteten Größen und die Integrale aus Anhang C verwendet werden. Das erzeugende Funktional für die Greenschen Funktionen des freien Fermionfeldes kann als $Z[\eta, \bar{\eta}]/Z[0,0]$ mit

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \exp \left\{ - \sum_{xy} \bar{\psi}_x Q_{xy} \psi_y + \sum_x [\bar{\eta}_x \psi_x - \bar{\psi}_x \eta_x] \right\} \quad (2.58)$$

definiert werden. Analog zu (C.15) kann dieses Integral zu

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \det Q \cdot \exp \left\{ - \sum_{xy} \bar{\eta}_x Q_{yx}^{-1} \eta_y \right\} \quad (2.59)$$

berechnet werden, womit für die Zustandssumme $Z = Z[0,0] = \det Q$ folgt. Die Zweipunktfunktion kann nun mit (C.14) berechnet werden, es ergibt sich

$$\langle \psi_y \bar{\psi}_x \rangle = \partial_{\bar{\eta}_y} \partial_{\eta_x} \frac{Z[\eta, \bar{\eta}]}{Z[0,0]} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} = Q_{yx}^{-1}. \quad (2.60)$$

Die Berechnung einer Zweipunktfunktion kann also über die Inversion der Fermionmatrix erfolgen und muss nicht durch die explizite Integration geschehen. Dies ist jedoch für große Matrizen lediglich numerisch möglich und ist mit großem Rechenaufwand verbunden. Ein größeres Problem stellt jedoch die Berechnung der Zustandssumme dar. Diese wird mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden durchgeführt.

3. Supersymmetrische Yang-Mills-Theorie

Die folgenden Abschnitte über Supersymmetrie sollen lediglich einen Überblick über die wesentlichen Zusammenhänge und Formeln in der Supersymmetrie als Hinführung zur supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie darstellen. Herleitungen sowie weitergehende Zusammenhänge können in der Literatur nachgelesen werden, zum Beispiel im Buch von Kalka und Soff [21], auf das sich diese Übersicht zu großen Teilen bezieht. Des Weiteren stützen sich die folgenden Abschnitte, besonders die zur supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie, auf die Arbeiten von Luckmann [22], Demmouche [23] und Sandbrink [24].

3.1. Poincaré-Superalgebra

Um die Poincaré-Superalgebra als Erweiterung der Poincaré-Algebra einzuführen, wird zunächst das Konzept der Graduierung benötigt. Im hier benötigten einfachsten Fall der \mathbb{Z}_2 graduierten Algebra besteht diese graduierte Algebra aus einem Vektorraum \mathbb{L} , welcher die direkte Summe aus zwei Unterräumen \mathbb{L}_0 und \mathbb{L}_1 ist

$$\mathbb{L} = \mathbb{L}_0 \oplus \mathbb{L}_1, \tag{3.1}$$

und einem Produkt \circ mit den Eigenschaften

$$u_1 \circ u_2 \in \mathbb{L}_0 \quad \forall u_1, u_2 \in \mathbb{L}_0 \tag{3.2}$$

$$u \circ v \in \mathbb{L}_1 \quad \forall u \in \mathbb{L}_0, v \in \mathbb{L}_1 \tag{3.3}$$

$$v_1 \circ v_2 \in \mathbb{L}_0 \quad \forall v_1, v_2 \in \mathbb{L}_1. \tag{3.4}$$

Die \mathbb{Z}_2 -Graduierung der Poincaré-Algebra liefert die Poincaré-Superalgebra. Dabei wird der Unterraum \mathbb{L}_0 von den zehn Generatoren P^μ , $M^{\mu\nu}$ der Poincaré-Algebra, welche die Raum-Zeit-Translationen und Rotationen darstellen, aufgespannt und durch \mathcal{N} Generatoren der Supersymmetrie Q_a ($a = 1, \dots, 4\mathcal{N}$) erweitert. Für jede \mathcal{N} -fache Erweiterung der Supersymmetrie werden also vier Generatoren Q_a eingeführt. Für den vorliegenden Fall von $\mathcal{N} = 1$ wird (Q_a) als Majorana-Spinor identifiziert, da ein Majorana-Spinor vier

Freiheitsgrade besitzt, während ein Dirac-Spinor durch seine vier komplexen Einträge acht Freiheitsgrade besitzt. Für Majorana-Spinoren Q gilt unter Ladungskonjugation mit $C = i\gamma^2\gamma^0$:

$$Q = C\bar{Q}^T, \quad \bar{Q} = Q^T C \quad (3.5)$$

Für Produkte im Unterraum \mathbb{L}_0 gelten mit $P^\mu \circ P^\nu \equiv [P^\mu, P^\nu]$ die Relationen der Poincaré-Algebra

$$\mathbb{L}_0 \times \mathbb{L}_0 \rightarrow \mathbb{L}_0 :$$

$$[P^\mu, P^\nu] = 0, \quad (3.6)$$

$$[P^\mu, M^{\rho\sigma}] = i(g^{\mu\nu}P^\sigma - g^{\mu\sigma}P^\rho), \quad (3.7)$$

$$[M^{\mu\nu}, M^{\rho\sigma}] = -i(g^{\mu\rho}M^{\nu\sigma} - g^{\mu\sigma}M^{\nu\rho} - g^{\nu\rho}M^{\mu\sigma} + g^{\nu\sigma}M^{\mu\rho}). \quad (3.8)$$

Für Produkte zwischen den Räumen \mathbb{L}_0 und \mathbb{L}_1 ist es notwendig, die Kommutatoren zwischen den SUSY-Generatoren und den Generatoren der Poincaré-Algebra zu definieren. Es gilt

$$\mathbb{L}_0 \times \mathbb{L}_1 \rightarrow \mathbb{L}_1 :$$

$$[P^\mu, Q_a] = 0, \quad (3.9)$$

$$[M^{\mu\nu}, Q_a] = -\sigma_{ab}^{\mu\nu} Q_b, \quad (3.10)$$

mit $\sigma_{ab}^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$. Für das dritte Produkt kann nach einem allgemeinen Ansatz aus der Forderung (3.4) die Beziehung

$$\mathbb{L}_1 \times \mathbb{L}_1 \rightarrow \mathbb{L}_0 :$$

$$\{Q_a, \bar{Q}_b\} = 2\gamma_{ab}^\mu P_\mu \quad (3.11)$$

gefunden werden.

3.2. SUSY-Teilchen

Die Teilchen des SUSY-Teilchenzoos leiten sich aus den irreduziblen Darstellungen der Poincaré-Superalgebra ab. Um diese klassifizieren zu können, werden die Casimir-Operatoren dieser Algebra betrachtet, welche mit allen Generatoren vertauschen. Wegen (3.9) ist der Casimir-Operator

$$P^2 = P_\mu P^\mu \quad (3.12)$$

der Poincaré-Algebra auch ein Casimir-Operator der Superalgebra. Mit diesem Operator lassen sich Teilchen nach ihrer Masse klassifizieren. Teilchen eines Super-Multipletts besitzen dieselbe Masse. Für die Definition eines zweiten Casimir-Operators wird der Superspin benötigt. Um diesen zu definieren, wird zunächst der Pauli-Lubanski-Vektor W^μ betrachtet, welcher die relativistische Verallgemeinerung des Spinvektors darstellt. Er ist über

$$W_\mu = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} P^\nu M^{\rho\sigma} \quad (3.13)$$

definiert. In der Poincaré-Algebra ist W^2 ein Casimir-Operator. Die Verallgemeinerung dieses Vektors, mit der eine Abhängigkeit von den SUSY-Generatoren geschaffen wird, gelingt, indem aus den Weyl-Spinoren Q und \bar{Q} ein Vierervektor

$$X^\mu = Q \sigma^\mu \bar{Q} \quad (3.14)$$

gebildet wird. Der verallgemeinerte Spinvektor Y^μ wird dann über

$$Y^\mu \equiv W^\mu - \frac{1}{4} X^\mu \quad (3.15)$$

definiert. Die Betrachtung des Kommutators

$$[Y^\mu, Y^\nu] = i \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} P^\rho Y^\sigma \quad (3.16)$$

zeigt, dass dessen Struktur der einer Drehimpulsalgebra ähnelt. Im Ruhesystem mit $P^\rho = (m, 0, 0, 0)$ geht der Kommutator in

$$[Y^\mu, Y^\nu] = i m \epsilon_{0\mu\nu\sigma} Y^\sigma \quad (3.17)$$

über. Das Produkt $\frac{1}{m} \vec{Y}$ wird Superspin genannt. Es ist Basiselement einer Drehimpulsalgebra. Die Eigenwerte des Superspins sind

$$\left(\frac{\vec{Y}}{m} \right)^2 = y(y+1) \quad \text{mit} \quad y = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (3.18)$$

Aus Y^μ und dem Generator der Translation P^μ lässt sich nun mit

$$C^{\mu\nu} \equiv Y^\mu P^\nu - Y^\nu P^\mu \quad (3.19)$$

der Operator $C^{\mu\nu}$ definieren, aus dem der Casimir-Operator

$$C^2 = C_{\mu\nu}C^{\mu\nu} \quad (3.20)$$

gebildet wird. Im Ruhesystem lässt sich

$$C^2 = -2m^2\vec{Y}^2 \quad (3.21)$$

schreiben, womit die Eigenwerte aus (3.18) folgen:

$$C^2 = -2m^4y(y+1) \quad \text{mit} \quad y = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (3.22)$$

Supersymmetrische Teilchen lassen sich somit durch Masse m und Superspin y klassifizieren. Innerhalb der durch diese Klassifikation gebildeten Super-Multipletts ist zusätzlich eine Unterscheidung nach der dritten Komponente des Superspins y_3 , sowie dem Eigenwert s_3 des relativistischen Spins $\frac{1}{m}W^3$ möglich.

Für $y = 0$ ergibt sich die einfachste Darstellung der SUSY-Algebra. Das Multiplett für $y = 0$ wird als chirales Supermultiplett bezeichnet. Es enthält ein skalares, ein pseudoskalares und ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen und beschreibt Materiefelder. Mit ihm können in der supersymmetrischen Erweiterung der QCD Quarks und Leptonen, sowie ihre Superpartner Squarks und Sleptonen dargestellt werden. Das Multiplett für den nächstgrößeren Superspin $y = 1/2$ ist das Vektor-Supermultiplett. Es enthält zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, ein (Spin-1) Vektorteilchen und ein skalares Teilchen. Mit dem Vektor-Supermultiplett können die Eichbosonen und ihre Superpartner, also Photonen, Gluonen und W- und Z-Bosonen sowie Photinos, Gluinos, Winos und Zinos, beschrieben werden.

3.3. Superfelder

Im Folgenden wird der Superraum-Formalismus zur Beschreibung der supersymmetrischen Theorie genutzt. Die Elemente im Superraum setzen sich aus vier bosonischen Koordinaten x^μ , sowie vier fermionischen Koordinaten, welche durch die zweikomponentigen Weyl-Spinoren θ und $\bar{\theta}$ ausgedrückt werden, zusammen. Das Superfeld $\mathcal{F}(x, \theta, \bar{\theta})$ hängt von diesen Koordinaten ab. Durch die Abhängigkeit von den Graßmann-wertigen Variablen lässt sich das Feld nach (C.2) vollständig nach θ und $\bar{\theta}$ entwickeln:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(x, \theta, \bar{\theta}) = & f(x) + \theta\phi(x) + \bar{\theta}\bar{\chi}(x) + (\theta\theta)M(x) + (\bar{\theta}\bar{\theta})N(x) \\ & + \theta\sigma^\mu\bar{\theta}A_\mu(x) + (\theta\theta)\bar{\theta}\bar{\lambda}(x) + (\bar{\theta}\bar{\theta})\theta\alpha(x) + (\theta\theta)(\bar{\theta}\bar{\theta})d(x) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Durch die Forderung, dass \mathcal{F} ein Lorentzskalar ist, lässt sich das Transformationsverhalten der Komponentenfelder unter Lorentztransformationen bestimmen. Das entwickelte Superfeld enthält

- vier komplexe skalare Felder: $f(x), M(x), N(x), d(x)$
- zwei linkshändige Weyl-Spinorfelder: $\phi(x), \alpha(x)$
- zwei rechtshändige Weyl-Spinorfelder: $\bar{\chi}(x), \bar{\lambda}(x)$
- ein komplexes Vektorfeld: $A_\mu(x)$.

Linearkombinationen von Superfeldern liefern wieder Superfelder, womit diese eine lineare Darstellung der SUSY-Algebra liefern, welche jedoch reduzibel ist. Die irreduziblen Darstellungen werden erhalten, indem Zusatzanforderungen, an das Superfeld gestellt werden.

Das chirale Superfeld erfüllt $\bar{D}_{\dot{A}}\mathcal{F} = 0$, das antichirale $D_A\mathcal{F} = 0$, wobei $\bar{D}_{\dot{A}}$ und D_A die kovarianten Ableitungen im Superraum sind. Für diese gilt

$$D_A = \partial_A + i(\sigma^\mu\theta)_A\partial_\mu, \quad \bar{D}_{\dot{A}} = -\partial_{\dot{A}} + i(\bar{\sigma}^\mu\theta)_{\dot{A}}\partial_\mu. \quad (3.24)$$

Das chirale Superfeld beinhaltet ein komplexes Skalarfeld zur Beschreibung von Sleptonen und Squarks, ein linkshändiges Weyl-Spinorfeld zur Beschreibung von Leptonen und Quarks und ein komplexes Skalarfeld als Hilfsfeld.

Das Vektor-Superfeld $V(x, \theta, \bar{\theta})$ erfüllt die Bedingung $V(x, \theta, \bar{\theta}) = V^\dagger(x, \theta, \bar{\theta})$, jedes reelle Superfeld ist also per Definition ein Vektor-Superfeld. Das Vektor-Superfeld enthält zwei Weyl-Spinorfelder, zwei reelle Skalarfelder, ein komplexes Skalarfeld und ein reelles Vektorfeld. In der Wess-Zumino-Eichung gilt

$$V_{WZ}(x, \theta, \bar{\theta}) = (\theta\sigma^\mu\bar{\theta})A_\mu + i(\theta\theta)(\bar{\theta}\bar{\lambda}) - i(\bar{\theta}\bar{\theta})(\theta\lambda) + (\theta\theta)(\bar{\theta}\bar{\theta})d \quad (3.25)$$

mit dem reellen Vektorfeld A_μ als Feld der Eichbosonen, dem komplexen Weyl-Spinorfeld λ als Feld der SUSY-Partner der Eichbosonen und dem reellen Skalarfeld d als Hilfsfeld, welches durch die Euler-Lagrange-Bewegungsgleichungen eliminiert werden kann.

Die supersymmetrische Feldstärke des Vektor-Superfeldes V in der adjungierten Darstellung ist definiert durch

$$W_A \equiv -\frac{1}{4}(\bar{D}\bar{D})e^{-V}D_Ae^V. \quad (3.26)$$

Sie ist invariant unter supersymmetrischen Eichtransformationen. Die Feldstärke lässt sich mit den bekannten Komponentenfeldern d und λ sowie dem antisymmetrischen

Feldstärketensor $F_{\mu\nu}$ aus (B.11) wie folgt darstellen [25]:

$$W_A^a = i\lambda_A^a - 2d^a\theta_A - (\sigma^{\mu\nu}\theta)_A F_{\mu\nu}^a - (\theta\theta)(\sigma^\mu D_\mu \bar{\lambda}^a)_A. \quad (3.27)$$

Dabei ist die kovariante Ableitung D_μ in der adjungierten Darstellung durch

$$(D_\mu \lambda)^a = \partial_\mu \lambda^a + g f_{abc} A_\mu^b \lambda^c \quad (3.28)$$

definiert, wobei f_{abc} die Strukturkonstante der Eichgruppe und g die Kopplungskonstante ist. Im Falle der SU(2) gilt $f_{abc} = \epsilon_{abc}$. Die Lagrangedichte des Vektor-Superfeldes kann mit dieser supersymmetrischen Feldstärke durch

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4} W^A W_A + h.c. \quad (3.29)$$

definiert werden, wobei mit $h.c.$ die hermitesch konjugierten Terme bezeichnet werden.

3.4. Supersymmetrische Lagrangedichten

Eine Wirkung S , die in der Form

$$S = \int d^4x \mathcal{L} \quad (3.30)$$

aus einer supersymmetrischen Lagrangedichte \mathcal{L} gebildet wird, muss invariant unter SUSY-Transformationen sein,

$$\delta_\epsilon S = 0. \quad (3.31)$$

Dafür muss die Lagrangedichte invariant bis auf eine Viererdivergenz

$$\delta_\epsilon \mathcal{L} = \partial_\mu \Lambda^\mu \quad (3.32)$$

sein, wobei Λ^μ einen Vierervektor symbolisiert, da diese Divergenz bei der Integration in ein Oberflächenintegral übergeht. Dieses verschwindet bei großen Integrationsvolumina, insbesondere wenn über den gesamten Raum integriert wird.

3.5. $\mathcal{N} = 1$ supersymmetrische Yang-Mills-Theorie

Das in dieser Arbeit betrachtete Modell ist die supersymmetrische Erweiterung der Yang-Mills-Theorie. Die Lagrangedichte der Kontinuumswirkung der $\mathcal{N} = 1$ supersymme-

trischen Yang-Mills-Theorie in der Wess-Zumino-Eichung kann durch Betrachtung der höchsten Komponente von $W^A W_A$ in der Lagrangedichte des Vektor-Superfeldes (3.29) durch

$$\mathcal{L}_{\text{SYM}} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{a,\mu\nu} + \frac{i}{2}\bar{\lambda}^a \gamma^\mu (D_\mu \lambda)^a + \frac{1}{2}d^a d^a \quad (3.33)$$

dargestellt werden [25, 26]. Sie enthält in der Feldstärke das Eichfeld $A_\mu^a(x)$ und ein Majorana-Fermion $\lambda = (\lambda_A; \bar{\lambda}^{\dot{A}})^T$ in der adjungierten Darstellung. Das Hilfsfeld d ohne kinetischen Term kann ausintegriert werden [27]. Die Lagrangedichte hat eine große Ähnlichkeit mit dem masselosen Limes einer ein-flavor QCD. Im Gegensatz zur QCD enthält \mathcal{L}_{SYM} die Fermionen jedoch in der adjungierten Darstellung, da diese die Superpartner der Eichbosonen sind und daher in derselben Darstellung wie diese enthalten sein müssen. Die Eichbosonen werden als Gluonen, die Superpartner als Gluinos identifiziert. Das Hinzufügen eines Massenterms

$$\mathcal{L}_m = \frac{m_g}{2}\bar{\lambda}\lambda \quad (3.34)$$

mit einer Gluino-Masse $m_g \neq 0$ bricht die Supersymmetrie weich, also so, dass keine ultravioletten Divergenzen in Massen von Skalaren auftreten. Wenn zusätzlich die imaginäre Zeit eingeführt wird, um in den euklidischen Raum überzugehen, lässt sich die Lagrangedichte als

$$\mathcal{L}_{\text{SYM},E} = \frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{a,\mu\nu} + \frac{1}{2}\bar{\lambda}^a \gamma^\mu (D_\mu \lambda)^a + \frac{m_g}{2}\bar{\lambda}^a \lambda^a \quad (3.35)$$

schreiben [27]. Da von nun an lediglich Größen in der euklidischen Metrik betrachtet werden, wird der Index E nicht mehr ausgeschrieben.

Ähnlich wie die ein-flavor QCD, die eine $U(1)_A \times U(1)_V$ -Symmetrie besitzt, wobei die $U(1)_A$ -Symmetrie durch die Adler-Bell-Jackiw-Anomalie gebrochen ist, besitzt die SYM ohne Massenterm neben der Supersymmetrie eine chirale $U(1)_A$ -Symmetrie, welche mit der sogenannten R-Symmetrie der Supersymmetrie zusammenfällt. Diese ist durch die Anomalie zu einer Z_{2N} -Symmetrie gebrochen. Durch die Bildung eines Gluino-Kondensats kommt es zu einer spontanen Symmetriebrechung zu einer Z_2 -Symmetrie [7, 26]. Dies entspricht einer Erhaltung der Fermionenzahl modulo zwei für die Majorana-Fermionen.

3.6. SYM-Massenmultipletts

In Analogie zur QCD erwartet man auch bei der supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie ein Confinement, welches sich durch den linearen Anstieg des Potentials zwischen zwei

statischen Quellen äußert. Als Konsequenz daraus besteht das Spektrum der SYM aus farbneutralen, gebundenen, hadronischen Zuständen aus den fundamentalen Feldern, den Gluonen und Gluinos. Um das Spektrum im Niederenergiebereich zu bestimmen, haben Veneziano und Yankielowicz [8] eine effektive Wirkung konstruiert, mit der die Teilchen des chiralen Wess-Zumino-Multipletts bestimmt werden konnten. Dieses Multiplett enthält

- $\bar{\lambda}\lambda$, ein aus zwei Gluinos bestehendes skalares Boson mit $J^{PC} = 0^{++}$, welches analog zum f_0 -Meson in der QCD, jedoch aus Fermionen in der adjungierten Darstellung zusammengesetzt ist und daher a - f_0 genannt wird,
- $\bar{\lambda}\gamma_5\lambda$, ein aus zwei Gluinos bestehendes pseudoskalares Boson mit $J^{PC} = 0^{-+}$, welches analog zum η' -Meson der QCD mit a - η' bezeichnet wird,
- $\chi = F^{a,\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\lambda^a$, ein aus einem Gluino und einem Gluon bestehendes Spin- $\frac{1}{2}$ Majorana-Fermion, welches als Gluino-Glueball bezeichnet wird und kein Analogon in der QCD besitzt.

In diesem Multiplett sind keine Gluebälle enthalten, obwohl es keine Begründung dafür gibt, warum sich keine gebundenen Gluon-Gluon-Zustände bilden sollten. Aus diesem Grund haben Farrar et al. [9, 10] einen weiteren Term in die effektive Wirkung von Veneziano und Yankielowicz [8] integriert und damit ein weiteres, leichteres Multiplett konstruiert, welches die Teilchen

- $F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$, einen skalaren Glueball mit $J^{PC} = 0^{++}$,
- $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}F^{\mu\nu}F^{\rho\sigma}$, einen pseudoskalaren Glueball mit $J^{PC} = 0^{-+}$
- χ , einen weiteren Gluino-Glueball-Zustand mit geringerer Masse

enthält. In [28] wird mit anderen Argumenten und Hinweisen aus der QCD hergeleitet, dass das Multiplett, welches die Gluino-Gluebälle enthält, das leichtere ist. Die Anordnung der beiden Multipletts ist also noch nicht vollständig geklärt. Zusätzlich wird eine Mischung zwischen den Zuständen erwartet, sodass physikalische Zustände aus Mischungen aus Gluebällen, Mesonen und Gluino-Gluebällen aufgebaut sind. Im Falle einer gebrochenen Supersymmetrie kommt es zur Aufspaltung der einzelnen Multipletts.

3.7. Gitterdiskretisierung der $\mathcal{N} = 1$ SYM

Eine diskretisierte Form der SYM wurde von Curci und Veneziano [29] vorgeschlagen. Dabei werden die Eichfelder der Eichgruppe $SU(N)$ durch Linkvariablen $U_\mu(x)$ dargestellt, die Eichwirkung S_g ist die in (2.28) eingeführte Wilson-Wirkung. Die Gluinos werden

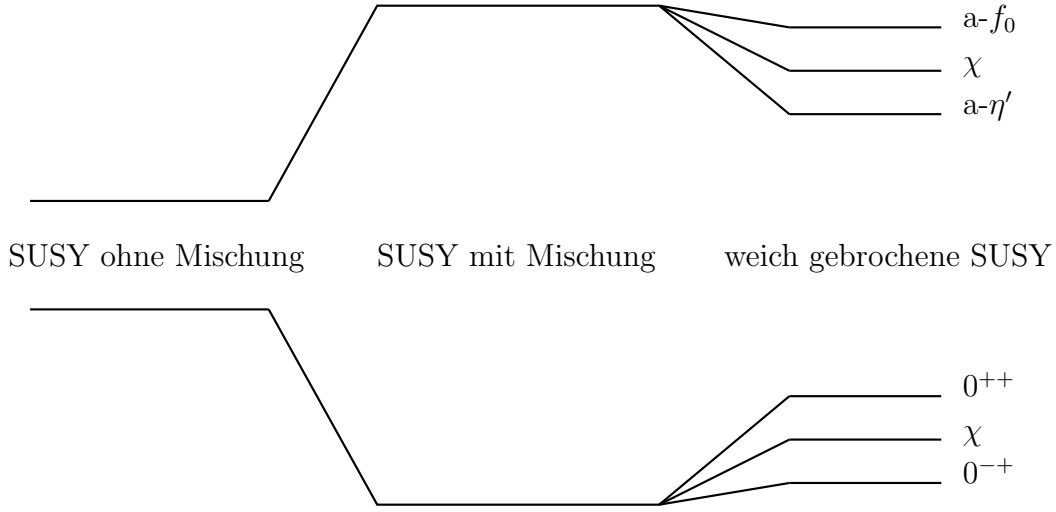


Abbildung 3.1.: Massenmultiplizität nach Farrar et al. [10]

durch Wilson-Fermionen beschrieben, jedoch werden sie im Unterschied zu (2.56) in der adjungierten Darstellung implementiert. Die Gitterwirkung kann dann durch

$$S_{CV} = S_g + S_f = \beta \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \left[1 - \frac{1}{N} \text{ReTr}[U_{\mu\nu}(x)] \right] + \frac{1}{2} \sum_{xy} \bar{\lambda}_x Q_{xy} \lambda_y \quad (3.36)$$

dargestellt werden, dabei ist die Fermionmatrix Q_{xy} durch

$$Q_{xy,ab,\alpha\beta} = \delta_{xy} \delta_{ab} \delta_{\alpha\beta} - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \left[(1 - \gamma_\mu)_{\alpha\beta} (V_\mu(x))_{ab} \delta_{x+\hat{\mu},y} + (1 + \gamma_\mu)_{\alpha\beta} (V_\mu^\dagger(x - \hat{\mu}))_{ab} \delta_{x-\hat{\mu},y} \right] \quad (3.37)$$

mit den Orts-, Farb- und Dirac-Indizes (x, a, α) und dem Hoppingparameter

$$\kappa = \frac{1}{2m_{g,0} + 8} \quad (3.38)$$

mit der nackten Gluinomasse $m_{g,0}$ definiert [30]. Für die Implementierung der Gluinos in der adjungierten Darstellung werden die Linkvariablen $V_\mu(x)$ verwendet. Diese hängen mit den Linkvariablen der fundamentalen Darstellung $U_\mu(x)$ über

$$[V_\mu(x)]^{ab} = 2\text{Tr}[U_\mu^\dagger(x) T^a U_\mu(x) T^b] \quad (3.39)$$

zusammen, wobei die T^a die Generatoren der Eichgruppe sind, für die $2\text{Tr}[T^a T^b] = \delta^{ab}$ gilt. Im Falle der in dieser Arbeit betrachteten $SU(2)$ gilt $T^a = \frac{1}{2}\sigma_a$ mit den Paulimatrizen

σ_a ($a = 1,2,3$). Die einzigen Parameter, durch die die Theorie definiert wird, sind also die nackte Eichkopplung $\beta = \frac{2N}{g_0}$ und die Gluinomasse $m_{g,0}$

Da die Gluinofelder $\bar{\lambda}$ und λ für Majorana-Fermionen nicht unabhängig sind, wird im fermionischen Pfadintegral lediglich über $\mathcal{D}\lambda$ integriert, sodass

$$\int \mathcal{D}\lambda e^{-S_f} = \int \mathcal{D}\lambda e^{-\bar{\lambda}Q\lambda} = \pm \sqrt{\det Q} \quad (3.40)$$

gilt [31]. Diese Relation lässt das Vorzeichen unbestimmt. Eine eindeutige Definition des Pfadintegrals über das Feld eines Majorana-Fermions ist durch

$$\int \mathcal{D}\lambda e^{-\bar{\lambda}Q\lambda} = \int \mathcal{D}\lambda e^{-\lambda M\lambda} = \text{Pf}(M) \quad (3.41)$$

gegeben, wobei die antisymmetrische Matrix M über

$$M \equiv CQ = -M^T \quad (3.42)$$

definiert ist [27]. Die Quadratwurzel der Determinanten der Fermion-Matrix wird als Pfaffsche Determinante $\text{Pf}(M)$ bezeichnet. Da die Determinante der Fermion-Matrix reell und nicht-negativ ist [27], ist $\text{Pf}(M)$ reell, kann jedoch positiv oder negativ sein. Das erzeugende Funktional mit einer externen Quelle $J(x)$ kann dann als Pfadintegral über die Eichfelder geschrieben werden,

$$Z[J] = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\lambda e^{-S_{cv} - J\lambda} = \int \mathcal{D}U \text{Pf}(CQ) \exp \left\{ -S_g - \frac{1}{2} \sum_{xy} J_x Q_{xy}^{-1} C^{-1} J_y \right\}. \quad (3.43)$$

3.8. Diskretisierungseffekte

Wie bei der Einführung der Ableitungen auf dem Gitter in Abschnitt 2.2 bereits angeführt, kommt es bei der Gitterdiskretisierung zu Diskretisierungseffekten im Vergleich zur Theorie im Kontinuum. Diese Effekte haben unterschiedliche Gründe und alle Fehlerquellen müssen bekannt sein und berücksichtigt werden, um aus den Ergebnissen aus Gittersimulationen eine Aussage für die Theorie im Kontinuum treffen zu können. Bei der Betrachtung der SYM hat die Diskretisierung einen besonderen Einfluss. Die Supersymmetrie ist, wie in (3.11) gezeigt, mit den Symmetrien der Poincaré-Algebra verknüpft. Da es auf dem Gitter keine infinitesimalen Verschiebungen gibt, ist die Supersymmetrie also wie auch die kontinuierlichen Symmetrien der Raumzeit gebrochen. Dies ist mit der Verletzung der Leibnizregel durch diskretisierte Ableitungen verbunden [32]. Des Weiteren ist die Supersymmetrie, ebenso wie die chirale $U(1)_R$ -Symmetrie, durch eine nicht-verschwindende Gluinomasse in der Curci-Veneziano-Wirkung (3.36) explizit

gebrochen. Eine weitere Ursache für eine gebrochene Supersymmetrie ist die endliche Ausdehnung des Gitters und die damit verbundene Wahl von periodischen Randbedingungen für Bosonen und antiperiodischen Randbedingungen für Fermionen [30].

Um den Einfluss der verschiedenen Effekte quantifizieren und gegebenenfalls durch geeignete Extrapolationen korrigieren zu können, müssen Simulationen für verschiedene Gittergrößen, Gluinomassen und Kopplungskonstanten durchgeführt werden. Für den Übergang zum Kontinuum muss dann zuerst die Extrapolation zum Limes eines unendlich großen Volumens vorgenommen werden. Anschließend folgt die Extrapolation zum Limes einer verschwindenden Gluinomasse. Dies ist durch die Veränderung des Hoppingparameters κ (3.38) möglich [29]. Wenn dieser auf den kritischen Wert κ_c eingestellt wird, verschwinden alle Terme, die die Gluinomasse enthalten und somit explizit die Symmetrie brechen. Der Wert für κ_c kann auf verschiedene Arten bestimmt werden. Zum einen ist er erreicht, wenn die Masse des adjungierten Pions $a\text{-}\pi$, eines Teilchens, das keinem physikalischen Zustand der SYM entspricht, verschwindet [33]. Zum anderen kann er mit Hilfe der supersymmetrischen Ward-Identitäten bestimmt werden [34]. Da eine Simulation am kritischen Punkt numerisch zu aufwändig ist, ist eine Extrapolation notwendig. Um schließlich die von der Gitterkonstanten abhängigen Fehler zu korrigieren, ist der Grenzfall $a \rightarrow 0$ oder entsprechend $\beta \rightarrow \infty$ notwendig. Dafür werden die gemessenen Größen für verschiedene Werte der Eichkopplung bestimmt, anschließend erfolgt erneut eine Extrapolation zum gewünschten Limes.

Wenn alle Extrapolationen erfolgt sind, ist die Supersymmetrie wieder hergestellt. Aussagen über die Theorie im Kontinuum, wie der Bildung von SUSY-Multipletts, können erst dann erfolgen.

3.9. Verbesserung der Wirkung

Die oben präsentierte Art, die Wirkung der supersymmetrischen Yang-Mills-Wirkung S_{SYM} zu diskretisieren, ist nicht die einzig zulässige. Jede Gitterwirkung, die im Kontinuumsimes in S_{SYM} übergeht, kann zur Beschreibung der Theorie auf dem Gitter verwendet werden. Daher ist es möglich, die diskretisierte Wirkung S_{CV} durch zusätzliche Terme zu verändern, um somit die Konvergenz zum Kontinuumsimes für $\beta \rightarrow \infty$ zu verbessern. Hier wird dazu die Eichwirkung S_g , welche die (1×1) -Plaketten enthält, mit (1×2) -Wilson-Schleifen, welche aus sechs Linkvariablen zusammengesetzt sind, erweitert. Die tree-level Symanzik (tlSym) verbesserte Eichwirkung lautet dann [35, 36, 37]

$$S_g^{\text{tlSym}} = \beta \sum_x \left(c_0 \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \left[1 - \frac{1}{N} \text{ReTr}[U_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x)] \right] + c_1 \sum_{\mu \neq \nu, \mu, \nu=1}^4 \left[1 - \frac{1}{N} \text{ReTr}[U_{\mu\nu}^{1 \times 2}(x)] \right] \right) \quad (3.44)$$

mit den Faktoren $c_0 = 1 - 8c_1$ und $c_1 = -\frac{1}{12}$.

Der fermionische Anteil der Wirkung kann durch die Anwendung von Stout-Smearing [38] verbessert werden. Dabei werden die Linkvariablen im Dirac-Wilson-Operator verändert. Die neuen Linkvariablen sind durch

$$U'_\mu(x) = U_\mu(x) \exp \left\{ \frac{1}{2}(\Omega_\mu(x) - \Omega_\mu^\dagger(x)) - \frac{1}{2N} \text{Tr}[\Omega_\mu(x) - \Omega_\mu^\dagger(x)] \right\} \quad (3.45)$$

definiert, wobei $U_\mu(x)$ die originale Linkvariable und $\Omega_\mu(x)$ über

$$\Omega_\mu(x) = \rho U_\mu^\dagger(x) C_\mu(x) \quad (\text{Keine Summation über } \mu) \quad (3.46)$$

mit der Summe

$$C_\mu(x) = \sum_{\nu \neq \mu} (U_\nu^\dagger(x + \hat{\mu}) U_\mu(x + \hat{\nu}) U_\nu(x) + U_\nu(x - \hat{\nu} + \hat{\mu}) U_\mu(x - \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x - \hat{\nu})) \quad (3.47)$$

definiert ist. Dabei ist der Parameter ρ bei den in dieser Arbeit genutzten Konfigurationen auf $\rho = 0,15$ festgelegt. Das Smearing kann im Prinzip mehrfach angewendet werden, dies sorgt jedoch für eine größere Ausdehnung der fermionischen Wirkung auf dem Gitter. Um die Wirkung lokalisiert zu halten, wird nur ein Smearing-Schritt angewendet [37].

3.10. Korrelator des Gluino-Glueballes

Gluino-Gluebälle der $\mathcal{N} = 1$ SYM werden, wie in Abschnitt 3.6 eingeführt, durch

$$\chi = \frac{1}{2} F^{a,\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \lambda^a = \sigma_{\mu\nu} \text{Tr}_c[F^{\mu\nu} \lambda] \quad (3.48)$$

dargestellt und sind Bestandteil beider Multipletts der effektiven Wirkung von Curci und Veneziano [29] und Farrar et al. [10]. Der entsprechende Operator auf dem Gitter wird nach [30, 37] durch

$$O_\chi^\alpha = \sum_{i < j} \sigma_{ij}^{\alpha\beta} \text{Tr}_c[P_{ij}(x) \lambda^\beta(x)] \quad (3.49)$$

dargestellt. Dabei werden nur die Raumkomponenten $i, j = 1, 2, 3$ betrachtet, es werden also keine Linkvariablen in Richtung der euklidischen Zeit mit einbezogen. Der

Feldstärketensor $F_{\mu\nu}$ wird durch den Clover-Plaketten-Operator $P_{\mu\nu}$ mit

$$P_{\mu\nu}(x) = \frac{1}{8ig_0} (U_{\mu\nu}^{(c)} - (U_{\mu\nu}^{(c)})^\dagger) \quad (3.50)$$

repräsentiert, welcher dieselben Eigenschaften in Bezug auf Paritäts- und Zeitumkehrtransformationen besitzt. Dabei ist $U_{\mu\nu}^{(c)}$ die Summe von Plaketten mit dem Eckpunkt x in der fundamentalen Darstellung,

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}^{(c)} &= U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x) \\ &\quad + U_\nu^\dagger(x - \hat{\nu})U_\mu(x - \hat{\nu})U_\nu(x - \hat{\nu} + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x) \\ &\quad + U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu})U_\nu^\dagger(x - \hat{\mu} - \hat{\nu})U_\mu(x - \hat{\mu} - \hat{\nu})U_\nu(x - \hat{\nu}) \\ &\quad + U_\nu(x)U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu} - \hat{\mu})U_\nu^\dagger(x - \hat{\mu})U_\mu(x - \hat{\mu}). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Die Verwendung von Zweipunkt-Korrelatoren zur Massenbestimmung wird in Abschnitt 4.3 beschrieben. Der Korrelator des Gluino-Glueball-Operators verbindet zwei Plaketten, eine an der Quelle und eine an der Senke, mit einem Gluino-Propagator, wie in Abbildung 3.2 skizziert. Er hat die Form

$$C_\chi^{\alpha\beta}(\Delta t) = -\frac{1}{4} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \sum_{i,j,k,l} \left\langle \sigma_{ij}^{\alpha\alpha'} \text{Tr}[U_{ij}(x)\sigma^a] Q_{x\alpha\alpha', y\beta\beta'}^{-1} \text{Tr}[U_{kl}(y)\sigma^b] \sigma_{kl}^{\beta'\beta} \right\rangle, \quad (3.52)$$

wobei $U_{ij}(x)$ die Plakette in Raumrichtung ist und $\frac{1}{2}\sigma^a$ die Generatoren der SU(2) sind, welche in dieser Arbeit als Eichgruppe gewählt ist.

Der Korrelator ist eine Matrix im Diracraum und kann in der Form

$$C_\chi^{\alpha\beta}(\Delta t) = C_1(\Delta t)\delta^{\alpha\beta} + C_{\gamma_4}(\Delta t)\gamma_4^{\alpha\beta} \quad (3.53)$$

dargestellt werden [39]. Dabei haben die beiden reellen Komponenten $C_1 = \frac{1}{4}\text{Tr}_D[C_\chi]$ und $C_{\gamma_4} = \frac{1}{4}\text{Tr}_D[\gamma_4 C_\chi]$ unter Zeitumkehr die Eigenschaften

$$C_1(\Delta t) = -C_1(T - \Delta t), \quad C_{\gamma_4}(\Delta t) = C_{\gamma_4}(T - \Delta t). \quad (3.54)$$

Die Komponenten können unabhängig voneinander gemessen und zur Massenbestimmung verwendet werden, C_1 liefert jedoch bei der Massenbestimmung des Grundzustandes das bessere Signal [30, 37].

Für die Verwendung des Korrelators bei den für diese Arbeit durchgeführten Messungen werden verschiedene Veränderungen des Korrelators vorgenommen, um das Signal zu verbessern. Die Linkvariablen können mittels APE-Smearing (siehe Abschnitt 4.4.1) verändert werden. Ohne Smearing entsprechen die Links U in $P_{\mu\nu}$ denen im Eichfeld-Teil

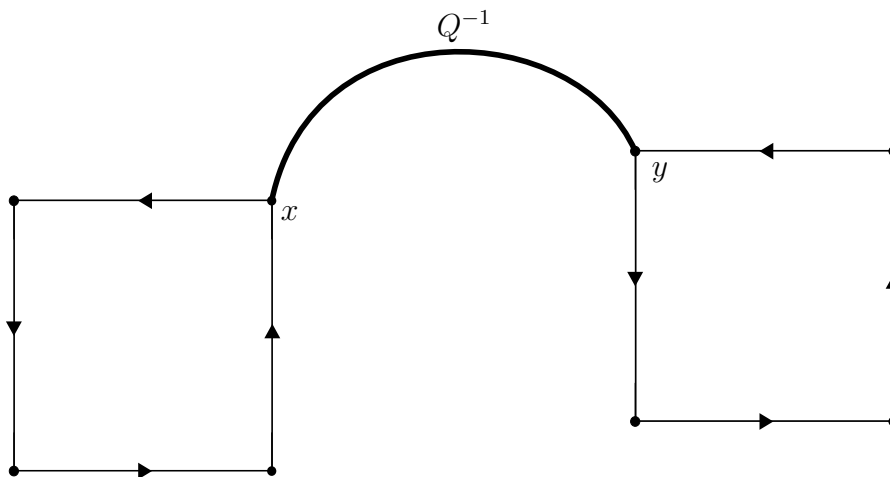


Abbildung 3.2.: Darstellung des Gluino-Glueball-Korrelators.

der Wirkung S_g . Gemäß der Definition des Dirac-Wilson-Operators in der verbesserten Wirkung der SYM enthält dieser durch Stout-Smearing (3.45) veränderte Linkvariablen V in der adjungierten Darstellung. Zusätzlich kann Stout-Smearing auf die Linkvariablen U im Korrelator angewendet werden. Dabei muss beachtet werden, dass zwei Smearinglevel die ersten beiden Punkte des Korrelators beeinflussen, da hier ein Smearing in zeitlicher Richtung stattfindet. Die fermionischen Feldvariablen können mittels Jacobi-Smearing (siehe Abschnitt 4.4.2) verschmiert und somit angepasst werden.

4. Numerische Methoden

Die Berechnung des Erwartungswertes eines von den Feldvariablen abhängigen Operators $O[U]$ beruht, wie in (2.34) gezeigt, auf der Auswertung des Pfadintegrals

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U e^{-S[U]} O[U] \quad \text{mit} \quad Z = \int \mathcal{D}U e^{-S[U]} \quad (4.1)$$

mit der Wirkung $S[U]$. Dabei wird hier aus Gründen der Übersichtlichkeit nur die Integration über rein bosonische Felder U betrachtet. Dieses im Kontinuum unendlichdimensionale Integral über die Feldvariablen geht bei der Gitterdiskretisierung über in ein Integral über die Feldvariablen auf den Gitterpunkten

$$\int \mathcal{D}U = \prod_{x \in \Lambda} \prod_{\mu=1}^4 \int dU_{\mu}(x). \quad (4.2)$$

Dennoch ist eine analytische Berechnung des Pfadintegrals außer bei sehr kleinen Gittern aufgrund der großen Anzahl an nötigen Integrationen nicht möglich [11]. Die zurzeit einzige Möglichkeit das Integral auszuwerten ist die Monte-Carlo-Integration. Dabei wird das Integral durch die endliche Summe über N Feldkonfigurationen $U^{(n)}$ approximiert,

$$\langle O \rangle \approx \bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O[U^{(n)}]. \quad (4.3)$$

Hier wird das sogenannte Importance Sampling der Feldkonfigurationen mit der Gewichtung $\propto e^{-S[U^{(n)}]}$ angewendet. Dies bedeutet, dass die Verteilung der Konfigurationen, welche für die Monte-Carlo-Integration generiert werden, dem Boltzmannfaktor $e^{-S[U^{(n)}]}$ folgt. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist dann

$$dP(U) = \frac{e^{-S[U]} \mathcal{D}U}{\int \mathcal{D}U e^{-S[U]}}. \quad (4.4)$$

4.1. Markow-Ketten

Um möglichst effizient Konfigurationen mit der gewünschten Verteilung zu generieren, wird ausgehend von einer Startkonfiguration mithilfe des Metropolisalgorithmus eine Markow-Kette aus Konfigurationen erzeugt. Dabei kann die Startkonfiguration $U^{(0)}$ willkürlich gewählt werden. Mittels des Markow-Prozesses wird dann eine Folge von Konfigurationen

$$U^{(0)} \longrightarrow U^{(1)} \longrightarrow U^{(2)} \longrightarrow \dots \quad (4.5)$$

generiert, die ab einer genügend großen Kettenlänge der Gleichgewichtsverteilung $P[U]$ folgen. Die Konfigurationen werden anhand ihrer Position in der Kette durchnummeriert. Der Index n wird dabei als Monte-Carlo-Zeit bezeichnet und darf nicht mit der euklidischen Zeit der vierdimensionalen Raumzeit verwechselt werden. Der Schritt von einer Konfiguration $U^{(n)}$ zur nachfolgenden Konfiguration $U^{(n+1)}$ wird als Update bezeichnet. Die Übergangswahrscheinlichkeit von einer Konfiguration in eine andere

$$P(U^{(n)} = U' | U^{(n-1)} = U) \equiv T(U'|U) \quad (4.6)$$

hat die Eigenschaften

$$0 \leq T(U'|U) \leq 1, \quad \sum_{U'} T(U'|U) = 1. \quad (4.7)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist nicht von der Position in der Markow-Kette, also der Monte-Carlo-Zeit n , abhängig, sondern hängt lediglich von der Ausgangskonfiguration U und der Zielkonfiguration U' ab. Der Markow-Prozess ist ergodisch, das heißt, dass jede Konfiguration in einer endlichen Anzahl an Schritten erreichbar ist. Um Gleichgewicht zu gewährleisten, wird die Bedingung

$$\sum_U T(U'|U)P(U) = P(U') \quad (4.8)$$

gestellt. Dieses Kriterium ist auf alle Fälle erfüllt, wenn die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts

$$T(U'|U)P(U) = T(U|U')P(U') \quad (4.9)$$

erfüllt wird, die Bedingung (4.8) also nicht mehr an alle Übergänge zusammen, sondern an jeden einzelnen Übergang gestellt wird. Es kann gezeigt werden, dass die Gleichgewichtsverteilung $P(U)$ einen Fixpunkt des Markow-Prozesses darstellt [11]. Dieser Fix-

punkt wird von jeder beliebigen Startkonfiguration aus erreicht. Nach einer genügend großen Anzahl an Updates liegt also die gewünschte Verteilung vor. Bevor die Berechnung einer Observablen mittels der Approximation des Pfadintegrals vorgenommen wird, müssen zunächst also genügend Schritte in der Markow-Kette erfolgt sein. Wenn dies der Fall ist, verbleibt das System jedoch im Gleichgewicht.

4.2. Metropolis-Algorithmus

Ein oft verwendeter Algorithmus, mit dem die Markow-Kette gemäß der obigen Vorgaben erzeugt werden kann, ist der Metropolis-Algorithmus [40]. Wenn dieser auf ein Eichfeld mit einer $SU(N)$ -Wilson-Wirkung angewendet wird, besteht der Unterschied zwischen zwei aufeinanderfolgenden Konfigurationen in der Änderung einer Linkvariable an der Position x in Richtung μ ,

$$U'_\mu(x) = XU_\mu(x). \quad (4.10)$$

Dabei ist X ebenfalls ein Element der Eichgruppe, welches sich nur gering von $\mathbf{1}$ unterscheidet. Der Metropolis-Algorithmus besteht aus drei Schritten. Im ersten Schritt wird durch die Änderung einer Linkvariablen gemäß (4.10) aus der Konfiguration U eine neue Konfiguration U' erzeugt. Wenn X und X^{-1} mit derselben Wahrscheinlichkeit gewählt werden, besteht eine symmetrische Auswahlwahrscheinlichkeit T_0 für den Übergang zwischen den beiden Konfigurationen,

$$T_0(U|U') = T_0(U'|U). \quad (4.11)$$

In diesem Fall wird die neue Konfiguration im zweiten Schritt mit der Akzeptanzwahrscheinlichkeit

$$T_A(U'|U) = \min(1, \exp(-\Delta S)) \quad \text{mit} \quad \Delta S = S[U'] - S[U] \quad (4.12)$$

angenommen. Um zu entscheiden, ob der Übergang zur neuen Konfiguration erfolgt, wird T_A mit einer Zufallszahl r aus dem Intervall $[0,1)$ verglichen. Im Falle $r \leq T_A$ wird der Schritt angenommen. Im Falle einer kleineren neuen Wirkung $\Delta S \leq 0$ wird der Schritt also in jedem Fall akzeptiert. Damit die Markow-Kette nicht in den Zustand minimaler Wirkung läuft und dort bleibt, was (4.9) verletzen würde, findet im Falle einer größer werdenden Wirkung der Vergleich mit r statt, welcher es ermöglicht, zu einer Konfiguration mit größerer Wirkung zu wechseln. Somit können alle Zustände der Boltzmannverteilung abgedeckt werden. Im Falle der Wilson-Wirkung in vier Dimensionen müssen zur Berechnung der Wirkungsdifferenz lediglich die sechs Plaketten betrachtet werden, in

denen die geänderte Linkvariable $U'_\mu(x)$ enthalten ist [11]. Nach dem Vergleich mit r und der Entscheidung, ob die neue Konfiguration angenommen wird, wird der Algorithmus mit der Veränderung einer Linkvariablen gemäß (4.10) fortgesetzt. Auf diese Weise werden Schritt für Schritt neue Konfigurationen in der Markow-Kette erzeugt. Da eine Konfiguration durch die Änderung einer Linkvariable lediglich lokal geändert wird, wird der Metropolis-Algorithmus als lokaler Algorithmus bezeichnet, welcher lediglich kleine Schritte in der Markow-Kette erzeugt und daher nur wenig effizient ist. Um Konfigurationen zu erzeugen, die weniger korreliert sind und eine hohe Akzeptanzwahrscheinlichkeit besitzen, existieren verschiedene nicht-lokale Monte-Carlo-Algorithmen. Zur Erzeugung der hier verwendeten Konfigurationen wird der *Two-Step Polynomial Hybrid Monte Carlo* (TS-PHMC) Algorithmus [41] verwendet, welcher in der Lage ist, Majorana-Fermionen zu berücksichtigen und welcher effizient Konfigurationen mit kurzer Autokorrelationszeit erzeugt [37].

4.3. Korrelatoren und Massenbestimmung

Wie in Abschnitt 3.6 beschrieben, werden für den niederenergetischen Bereich der supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie Teilchen in verschiedenen Supermultipletts erwartet. Um die Massen dieser gebundenen Zustände zu bestimmen, werden Zweipunkt-Korrelatoren

$$C'(x,y) = \langle O(x)O^\dagger(y) \rangle \quad (4.13)$$

eingeführt. Dieser Korrelator beschreibt ein Teilchen, das im Ort y , der Quelle, erzeugt und in x , der Senke, wieder vernichtet wird. Der Operator O beschreibt dabei das zu betrachtende Teilchen, indem er dieselben Quantenzahlen J^{PC} , also Spin, Parität und Ladung wie dieses besitzt. Es ist also möglich ein Teilchen durch verschiedene Operatoren zu beschreiben, die alle einen unterschiedlich großen Überlapp mit der Wellenfunktion des Teilchens besitzen, jedoch durch dieselben Quantenzahlen klassifiziert werden können. Nach (4.3) kann der Wert des Korrelators in Monte-Carlo-Simulationen über

$$\langle O(x)O^\dagger(y) \rangle_U \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (O(x)O^\dagger(y))[U^{(n)}] \quad (4.14)$$

approximiert werden, wobei über die Auswertung der Operatoren auf N Konfigurationen gemittelt wird. Für die Extraktion der Masse wird die zeitliche Veränderung des Korrelators betrachtet. Die Fouriertransformation des Korrelators in den Ortskomponenten

des euklidischen Raumes wird auf dem Gitter mit dem Volumen $V = L^3 \times T$ über

$$C(t, \vec{p}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}} C''(x, y = 0) \quad (4.15)$$

berechnet. Aufgrund der Translationsinvarianz des Korrelators kann hier $y = 0$ verwendet werden. Diese Transformation ist gleich der Korrelationsfunktion der Zeitscheiben $S(t, \vec{p})$ mit

$$S(t, \vec{p}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}} O(\vec{x}, t). \quad (4.16)$$

Mit den Zeitscheiben ohne räumlichen Impuls ($\vec{p} = 0$)

$$S_t = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{x}} O(\vec{x}, t) \quad (4.17)$$

lässt sich der Korrelator bei der zeitlichen Differenz $\Delta t = x^4 - y^4$ durch

$$C(\Delta t) = \langle S_{t+\Delta t}^\dagger S_t \rangle \quad (4.18)$$

ausdrücken. Mit dem Einfügen eines vollständigen Satzes von Eigenzuständen

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad (4.19)$$

in den Korrelator wird die Spektralzerlegung

$$\begin{aligned} C(\Delta t) &= \sum_{n=0} \left(|\langle n|S_t|0\rangle|^2 e^{-E_n \Delta t} \pm |\langle 0|S_t^\dagger|n\rangle|^2 e^{-E_n(T-\Delta t)} \right) \\ &= a_0^2 + \sum_{n=1} (a_n^2 e^{-E_n \Delta t} \pm a_n^2 e^{-E_n(T-\Delta t)}) \end{aligned} \quad (4.20)$$

erhalten. Das Vorzeichen des jeweils zweiten Terms in der Summe hängt von den Randbedingungen in zeitlicher Richtung ab. Für periodische Randbedingungen wird der zweite Term addiert, für antiperiodische wird er subtrahiert. Die Größe a_0^2 ist für Operatoren, die mit dem Vakuum überlappen, ungleich Null. In diesem Fall ist es üblich, die Größe durch die Transformation

$$S_t \rightarrow \tilde{S}_t = S_t - \langle S_t \rangle_U \quad (4.21)$$

zu subtrahieren. Dabei ist $\langle S_t \rangle_U$ der Vakuumerwartungswert des Zeitscheibenoperators. Der neue Operator \tilde{S}_t kann dann in die Korrelationsfunktion eingesetzt werden. Für

große Zeiten $t \rightarrow \infty$ ist der Korrelator exponentiell gedämpft und die Terme, welche zum Zustand $n = 1$ der geringsten Energie $E_1 \equiv m_1$ gehören, dominieren. Dies legt die Grundlage dafür, die Masse des Grundzustands m_1 über einen Fit an die Funktion

$$C(\Delta t) = a_1^2 (e^{-m_1 \Delta t} \pm e^{-m_1(T-\Delta t)}) \quad (4.22)$$

im Fitintervall $\Delta t \in [t_1, t_2]$ bestimmen zu können. Dabei ist die richtige Wahl des Intervalls von entscheidender Bedeutung. Für zu kleine Zeiten t_1 sind die Beiträge der höheren Zustände mit $m > m_1$ noch nicht genug abgeklungen. Der Wert des Korrelators wird für diese Zeiten noch zu stark von den angeregten Zuständen beeinflusst und ein hinreichend genauer Fit ist nicht möglich. Gleichzeitig verschlechtert sich das Signal-Rausch-Verhältnis mit größer werdenden Zeitdifferenzen, sodass zu große Δt den Fit ebenfalls verschlechtern, obwohl der Korrelator für große t_2 von den Beiträgen des Grundzustandes dominiert wird.

Einen guten Anhaltspunkt für die Wahl des Fitintervalls liefert die effektive Masse

$$m_{\text{eff}}(\Delta t) = \ln \frac{C(\Delta t)}{C(\Delta t + 1)}, \quad (4.23)$$

welche, wenn sie gegen die Zeitdifferenz Δt aufgetragen wird, unter idealen Bedingungen ein Plateau in dem Bereich bildet, in dem der Wert des Korrelators vom Grundzustand dominiert wird. In diesem Bereich sollte der Fit an (4.22) durchgeführt werden. Gleichzeitig kann aus dem Wert der effektiven Masse im Plateau bereits eine Abschätzung der Masse gewonnen werden, die jedoch für jede Masse $m_{\text{eff}}(\Delta t)$ nur von zwei Zeiten eines Korrelators $C(\Delta t)$ abhängt und damit nicht so viel Information enthält, wie die aus der Fitprozedur gewonnene Masse.

Um das Signal-Rausch-Verhältnis zu verbessern, ist es möglich, den Korrelator, je nach Randbedingungen, zu (anti-)parallelisieren. Statt des Korrelators $C(\Delta t)$ im Intervall $[0, T]$ wird dann

$$C'(\Delta t) = \frac{1}{2} (C(\Delta t) \pm C(T - \Delta t)) \quad (4.24)$$

im Intervall $[0, \frac{T}{2}]$ betrachtet. Diese Symmetrisierung wird bei allen untersuchten Korrelatoren vorgenommen, weshalb im weiteren Verlauf auf die explizite Kennzeichnung $C'(\Delta t)$ verzichtet und $C(\Delta t)$ verwendet wird.

4.4. Smearing

Aufgrund der oben beschriebenen Probleme bei der Massenbestimmung erscheint es wichtig, die Prozedur so zu optimieren, dass die Genauigkeit erhöht werden kann, ohne den numerischen Aufwand zu stark zu vergrößern. Eine Methode, dies zu erreichen, ist die Verbesserung des Überlapps der verwendeten Operatoren mit der Wellenfunktion des Grundzustandes des zu untersuchenden Teilchens. Bei manchen Teilchen sind lokale Operatoren nicht gut geeignet, um diesen Überlapp zu erreichen. Eine Methode, die verwendeten Operatoren zu verbessern, ist das sogenannte Smearing, welches zusätzlich unphysikalische Fluktuationen auf kurzen Distanzen entfernt.

4.4.1. APE Smearing

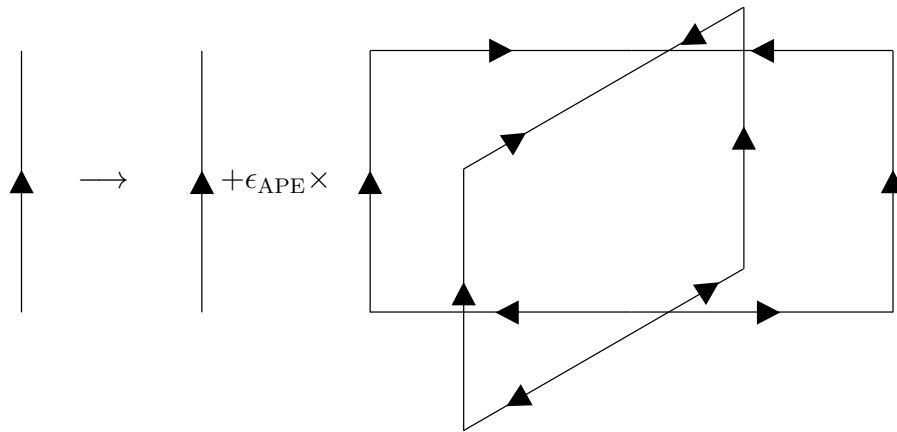


Abbildung 4.1.: APE Smearing in eine Raumrichtung.

Beim APE Smearing [42] werden die einzelnen räumlichen Linkvariablen $U_i(x)$, $i = 1, 2, 3$ durch die Summe der sie umgebenden, orthogonalen räumlichen Links erweitert,

$$U_i(x) \rightarrow U'_i(x) = U_i(x) + \epsilon_{\text{APE}} \sum_{j=\pm 1, j \neq i}^{\pm 3} U_j(x) U_i(x + \hat{j}) U_j^\dagger(x + \hat{i}) \quad (4.25)$$

mit dem Parameter ϵ_{APE} , der die Stärke des Smearings beeinflusst. Die Prozedur ist durch die Linkvariablen in Abbildung 4.1 veranschaulicht. Die neu entstehende Linkvariable ist im Allgemeinen kein Element der Eichgruppe mehr, weshalb anschließend eine Projektion in die Eichgruppe erfolgen muss. Im Falle der $SU(2)$ erfolgt diese mit

$$U_\mu^s(x) = \mathcal{P}_{SU(2)}[U'_\mu(x)] \quad (4.26)$$

mit der Projektionsmatrix

$$\mathcal{P}_{\text{SU}(2)}[U'_\mu(x)] = \frac{U'_\mu(x)}{\sqrt{\frac{1}{2}\text{Tr}[U'_\mu(x)U'_\mu(x)]}}. \quad (4.27)$$

Das Smearing kann mehrfach iterativ angewendet werden, die Anzahl an Smearingschritten, auch Smearinglevel genannt, wird mit N_{APE} angegeben. Durch wiederholtes Smearing wächst die räumliche Ausdehnung des Operators. Der Smearingradius kann mit [23]

$$R_{\text{APE}} = \epsilon_{\text{APE}} N_{\text{APE}} \quad (4.28)$$

abgeschätzt werden. Aufgrund der periodischen Randbedingungen sollte er nicht größer als die halbe räumliche Ausdehnung des Gitters sein. Durch ein zu großes N_{APE} kann es außerdem dazu kommen, dass Informationen über den zu untersuchenden gebundenen Zustand verloren gehen. Daher ist es sinnvoll, die Qualität der Massenbestimmung bei unterschiedlichen Smearingleveln zu beobachten, um das optimale N_{APE} zu bestimmen.

4.4.2. Jacobi-Smearing

Eine Verbesserung des Signals der fermionischen Variablen λ ist mittels Jacobi-Smearing möglich [43, 44]. Die eichinvariante, verschmierte Quelle S_S des Propagators erfüllt

$$\sum_{\vec{x}} K(\vec{x}, t; \vec{x}', t) S_S(\vec{x}', t) = S_0(\vec{x}, t) \quad (4.29)$$

mit der unverschmierten Quelle S_0 und $K = 1 - \kappa_J F$ mit

$$F_{\alpha\beta}^{ab}(\vec{x}, t; \vec{y}, t) = \delta_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^3 \left[V_i^{ab}(\vec{x}, t) \delta_{\vec{x}+\hat{i}, \vec{y}} + V_i^{\dagger ab}(\vec{x} - \hat{i}, t) \delta_{\vec{x}-\hat{i}, \vec{y}} \right]. \quad (4.30)$$

Um die verschmierte Quelle zu bestimmen, wird also K^{-1} benötigt. Zur Bestimmung wird jedoch keine explizite Inversion von K durchgeführt. Stattdessen wird die Quelle durch die Jacobi-Iteration

$$S_S^{(n)}(\vec{x}, t) = S_0(\vec{x}, t) + \kappa_J F S_S^{(n-1)}(\vec{x}, t), \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.31)$$

mit N_J Schritten angenähert. Das Smearing wird dann durch die beiden Parameter κ_J und N_J beeinflusst. Für genügend kleine κ_J konvergiert die Iteration zur gewünschten Lösung, doch auch für κ_J größer als der für die Konvergenz kritische Wert liefert die Prozedur trotz der Divergenz der Summe eine geeignete verschmierte Quelle für ein be-

liebigen N_J . Die Anzahl der Iterationsschritte N_J beeinflusst die Größe des verschmierten Objektes, dabei ist es gewünscht, die Größe der physikalischen Wellenfunktion zu erreichen. Der Smearingradius r kann mit

$$r^2 = \frac{\sum_{\vec{x}} \vec{x}^2 |S_S(\vec{x}, t)|}{\sum_{\vec{x}} |S_S(\vec{x}, t)|} \quad (4.32)$$

abgeschätzt werden, wobei \vec{x}^2 auf einem periodischen Gitter der minimale quadratische Abstand zum Ursprung ist.

4.5. Variationsmethode

Um die Massenbestimmung des Grundzustandes weiter zu verbessern, kann die Variationsmethode verwendet werden, welche es ermöglicht, die Informationen mehrerer Operatoren gleicher Quantenzahlen zu berücksichtigen. Durch diese Verbesserung hat die Variationsmethode einen deutlichen Einfluss auf die Massenbestimmung angeregter Zustände.

Wie in (4.20) gezeigt, werden die Korrelatoren vom Grundzustand dominiert, jedoch durch Beiträge von Zuständen höherer Energie beeinflusst, welche mit größerer Zeit exponentiell gedämpft werden. Die Untersuchung eines spezifischen angeregten Zustandes gestaltet sich aufgrund der Dominanz des Grundzustandes auf der einen und der Beeinflussung durch höhere Zustände auf der anderen Seite als schwierig. Der direkte Fit einer Funktion

$$f(\Delta t) = \sum_{n=1}^N a_n e^{-m_n \Delta t} \quad (4.33)$$

an einen Korrelator, um die Massen von N Zuständen zu bestimmen, ist aufgrund der fehlerbehafteten Messdaten der Monte-Carlo-Simulation nicht zuverlässig [11].

Mithilfe der Variationsmethode ist es möglich, durch die Verwendung der Information mehrerer Operatoren auch Massen angeregter Zustände zu extrahieren. Allgemein kann diese Methode in einem beliebigen physikalischen System mit bekanntem, zeitabhängigem Hamiltonoperator $H = H(t)$ eingesetzt werden, um die Eigenwerte und zugehörigen Eigenzustände zu bestimmen [45] und kann auf beliebige hermitesche Operatoren O erweitert werden. Für den normierten Erwartungswert $\langle O \rangle$ eines hermiteschen

Operators in einem beliebigen Zustand $|\varphi\rangle$ gilt

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \varphi | O | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} \quad \text{mit} \quad |\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (4.34)$$

wobei $|n\rangle$ die Eigenzustände von O sind. Durch Variation des Zustands $|\varphi\rangle$ kann gezeigt werden, dass der Erwartungswert von O in der Umgebung seiner diskreten Eigenwerte stationär ist. Dafür wird (4.34) in der Form

$$\langle O \rangle \langle \varphi | \varphi \rangle = \langle \varphi | O | \varphi \rangle \quad (4.35)$$

geschrieben. Wenn nun eine kleine Variation eingeführt wird, ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle \delta \langle O \rangle + \langle O \rangle [\langle \delta \varphi | \varphi \rangle + \langle \varphi | \delta \varphi \rangle] &= \langle \delta \varphi | O | \varphi \rangle + \langle \varphi | O | \delta \varphi \rangle \\ \Leftrightarrow \langle \delta \varphi | [O - \langle O \rangle] | \varphi \rangle + \langle \varphi | [O - \langle O \rangle] | \delta \varphi \rangle &= \langle \varphi | \varphi \rangle \delta \langle O \rangle. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Der Erwartungswert wird also stationär, $\delta \langle O \rangle = 0$, wenn

$$O|\varphi\rangle = \langle O \rangle |\varphi\rangle \quad (4.37)$$

gilt, der Zustand $|\varphi\rangle$ also einen Eigenzustand von O darstellt. In diesem Fall ist der Erwartungswert ein Eigenwert des Operators. Durch die Variation des Zustandes $|\varphi\rangle$ können also die Extrema des Erwartungswertes gefunden werden, welche die Eigenwerte liefern.

Zur Bestimmung der Energieeigenwerte eines Teilchens für die Massenbestimmung wird als Operator nun eine Korrelationsmatrix $C(t)$ der Form

$$C_{ij}(t) = \langle O_i(t) O_j^\dagger(0) \rangle \quad (4.38)$$

verwendet. Die Operatoren O_i haben dabei alle die Quantenzahlen des zu untersuchenden gebundenen Zustandes. In der Spektralzerlegung hat die Korrelationsmatrix die Form

$$C_{ij}(t) = \sum_n^{\infty} \langle 0 | O_i | n \rangle \langle n | O_j^\dagger | 0 \rangle e^{-m_n t}. \quad (4.39)$$

Die Variation des Ausdrucks

$$\frac{\langle \varphi | e^{-H(t-t_0)} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \frac{\langle \varphi | C(t) | \varphi \rangle}{\langle \varphi | C(t_0) | \varphi \rangle} \quad (4.40)$$

mit $C(t) = (C_{ij})(t)$ führt analog zu obigen Ausführungen zum verallgemeinerten Eigen-

wertproblem

$$C(t)\mathbf{v}^{(n)} = \lambda^{(n)}(t, t_0)C(t_0)\mathbf{v}^{(n)}, \quad (4.41)$$

wobei $\lambda^{(n)}(t, t_0)$ die verallgemeinerten Eigenwerte und $\mathbf{v}^{(n)}$ die entsprechenden verallgemeinerten Eigenvektoren sind. Dieses verallgemeinerte Eigenwertproblem kann für eine positiv definite Korrelationsmatrix in ein reguläres Eigenwertproblem umgeschrieben werden. Für den Fall, dass die Eigenwerte $\lambda^{(n)}(t)$ des Eigenwertproblems

$$C(t)\mathbf{v}^{(n)} = \lambda^{(n)}(t)\mathbf{v}^{(n)} \quad (4.42)$$

für jedes $t \geq 0$ gemäß $\lambda^{(1)} \geq \lambda^{(2)} \geq \dots \geq \lambda^{(r)}$ geordnet sind, haben Lüscher und Wolff [46] gezeigt, dass diese sich gemäß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lambda^{(n)}(t) \propto e^{-m_n t} (1 + \mathcal{O}(e^{-\Delta m_n t})) \quad (4.43)$$

verhalten, wobei Δm_n die kleinste Differenz zu den anderen Spektralwerten m_l ist. Die Lösung des verallgemeinerten Eigenwertproblems (4.41) mit $t_0 < t$ führt hier jedoch zu besseren Ergebnissen, da hier das zeitliche Verhalten der Eigenwerte dasselbe, die Amplitude der Fehlerterme aber kleiner ist [11]. Dadurch dominieren die führenden Terme bereits für kleine Zeiten t . Um dieses verallgemeinerte Eigenwertproblem nun für die Eigenwerte $\lambda^{(n)}$ mit $n = 1, \dots, A$ zu lösen, ist eine $r \times r$ Korrelationsmatrix $C'_{ij}(t)$ mit $r \geq A$ notwendig. Dafür wird die Korrelationsmatrix aus r verschiedenen Operatoren aufgebaut. Diese können durch explizite Konstruktion oder durch Smearing anderer Operatoren konstruiert werden. Nach Lüscher und Wolff [46] sollte die Anzahl der Operatoren r auf einem Gitter der Länge L kleiner oder gleich $L/2$ sein, um sicherzustellen, dass die Operatoren linear unabhängig sind. Ist dies nicht der Fall, so ist die Korrelationsmatrix nicht mehr positiv definit. Für die $r \times r$ -Matrix $C'_{ij}(t)$ kann das Eigenwertproblem nun exakt für einen endlich dimensionalen Eigenraum mit den Zuständen $|n\rangle$, $n = 1, \dots, r$ zu

$$\lambda'^{(n)}(t, t_0) = e^{-(t-t_0)m_n} \quad (4.44)$$

gelöst werden. Wenn man nun den unendlich-dimensionalen Eigenraum betrachtet und die Korrelationsmatrix in der Form $C(t) = C'(t) + C^p(t)$ schreibt, wobei $C^p(t)$ als Störung behandelt wird, so kann davon ausgegangen werden, dass die großen Eigenwerte nicht zu stark von dieser Störung beeinflusst werden. Die Eigenwerte des verallgemeinerten Eigenwertproblems verhalten sich dann gemäß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lambda^{(n)}(t, t_0) \propto e^{-m_n(t-t_0)} (1 + \mathcal{O}(e^{-\Delta m_n(t-t_0)})), \quad \Delta m_n = \min_{l \neq n} |m_l - m_n|. \quad (4.45)$$

Nach Blossier et al. [47] lassen sich die Fehler zu $\Delta m_n = |m_{r+1} - m_n|$ verringern, wenn t_0 möglichst groß gewählt wird und $t_0 \geq t/2$ gilt. In der Praxis ist jedoch meist nur ein kleiner Wert für t_0 , oder sogar $t_0 = 0$ möglich, da es sonst zu numerischen Instabilitäten kommt [46]. Die Qualität der Analyse mittels Variationsmethoden hängt von den verwendeten Operatoren ab. Diese sollten einen großen Überlapp mit der Wellenfunktion des zu untersuchenden Zustandes haben und möglichst orthogonal zueinander sein [48]. Mit Hilfe der Lösung des Eigenwertproblems wird die optimale Kombination der Operatoren gefunden, durch die ein möglichst großer Überlapp mit der Wellenfunktion erreicht werden kann. Daher können in der Korrelationsmatrix auch Operatoren enthalten sein, die einen kleinen Überlapp haben. Eine große Korrelationsmatrix kann also vorteilhaft sein. Da Operatoren mit kleinem Überlapp jedoch mit Rauschen zum Ergebnis beitragen, ist es sinnvoll, die Methode zunächst für eine große Anzahl an Operatoren zu betrachten und anschließend die Kombination mit dem besten Signal-Rausch-Verhältnis zu wählen. Zudem muss beachtet werden, dass linear abhängige Operatoren die Lösung des Eigenwertproblems verhindern.

Zur Massenbestimmung nach der *t-Eigenvektor-Methode* wird das verallgemeinerte Eigenwertproblem (4.41) für jede Zeit t gelöst und die entsprechenden Eigenwerte bestimmt. Die effektiven Massen der angeregten Zustände werden dann analog zu (4.23) mittels

$$m_{\text{eff}}^{(n)}(t, t_0) = \ln \frac{\lambda^{(n)}(t, t_0)}{\lambda^{(n)}(t+1, t_0)} \quad (4.46)$$

bestimmt. Die Eigenwerte können analog zum Fall der Massenbestimmung mit einzelnen Korrelatoren für Fits zur Massenbestimmung genutzt werden [23, 24].

Im Falle von entarteten oder beinahe entarteten Energie-Eigenwerten kann es zusammen mit numerischen Fehlern dazu kommen, dass das eindeutige Ordnen der Eigenwerte und ihrer Eigenvektoren nach der Größe für verschiedene Zeiten nicht eindeutig ist [49]. Um dies zu vermeiden, wird die Basis der Eigenvektoren dadurch festgelegt, dass das Eigenwertproblem lediglich zu einer Zeit $t_1 > t_0$ gelöst wird:

$$C(t_1)\mathbf{v}^{(n)} = \lambda^{(n)}(t_1, t_0)C(t_0)\mathbf{v}^{(n)}. \quad (4.47)$$

Dabei sollte t_1 so klein wie möglich gewählt werden, gleichzeitig aber groß genug, um sicherzustellen, dass die Schätzer für die Eigenvektoren $\mathbf{v}^{(n)}(t_1)$ sich stabilisiert haben. Zur Bestimmung der effektiven Masse wird bei dieser *fixed-vector Methode* die Korrelationsfunktion zur Zeit t auf den Eigenraum zur Zeit t_1 projiziert. Damit ergibt sich

$$m_{\text{eff}}^{(n)}(t, t_0) = \ln \frac{(\mathbf{v}^{(n)})^\dagger(t_1, t_0)C(t)\mathbf{v}^{(n)}(t_1, t_0)}{(\mathbf{v}^{(n)})^\dagger(t_1, t_0)C(t+1)\mathbf{v}^{(n)}(t_1, t_0)}. \quad (4.48)$$

Dadurch, dass das Eigenwertproblem lediglich bei t_1 gelöst wird, ist auch nur hier Orthogonalität

$$(\mathbf{v}^i)^\dagger(t_1, t_0)C(t)\mathbf{v}^j(t_1, t_0) = 0 \quad i \neq j \quad (4.49)$$

garantiert. Da hier also für Zeiten $t > t_1$ Anteile des niedrigsten Zustandes enthalten sind, wird diese Korrelationsfunktion der fixed-vector Methode für große Zeiten zum Grundzustand abfallen [49],

$$(\mathbf{v}^{(n)})^\dagger(t_1, t_0)C(t)\mathbf{v}^{(n)}(t_1, t_0) \stackrel{t \gg t_1}{\propto} e^{-m_1 t}. \quad (4.50)$$

Eine weitere Methode, aus einer Korrelationsmatrix die Masse eines angeregten Zustandes zu extrahieren, ist die *Projektionsmethode* [50]. Sie stellt eine Mischung aus den vorherigen Methoden dar. Hier wird das verallgemeinerte Eigenwertproblem für jede Zeit t gelöst, jedoch nicht mit einer festen Referenzzeit, sondern mit einer zweiten Zeit $t + \Delta t$, so dass die Lösung von

$$C(t + \Delta t)\mathbf{v}^{(n)} = \lambda^{(n)}(t, \Delta t)C(t)\mathbf{v}^{(n)} \quad (4.51)$$

bestimmt werden muss. Zusätzlich wird das Eigenwertproblem für die Linkseigenvektoren $\mathbf{u}^{(n)}$ gelöst,

$$\mathbf{u}^{(n)}C(t + \Delta t) = \lambda^{(n)}(t, \Delta t)\mathbf{u}^{(n)}C(t). \quad (4.52)$$

Bei symmetrischen Korrelationsmatrizen fallen diese Links- und Rechtseigenvektoren zusammen. Der projizierte Korrelator wird dann analog zur vorherigen Methode zur Berechnung der effektiven Masse

$$m_{\text{eff}}^{(n)}(t, \Delta t) = \ln \frac{\mathbf{u}^{(n)}(t, \Delta t)C(t)\mathbf{v}^{(n)}(t, \Delta t)}{\mathbf{u}^{(n)}(t, \Delta t)C(t + 1)\mathbf{v}^{(n)}(t, \Delta t)} \quad (4.53)$$

verwendet. Ein Exponentialfit kann auch hier direkt an die projizierte Funktion erfolgen. Nach Mahbub et al. [50] sind die mittels Projektionsmethode extrahierten Massen, im Gegensatz zu den Eigenwerten der t-Eigenvektor-Methode, nahezu unabhängig von den verwendeten Parametern t und Δt in der Variationsmethode.

4.5.1. Numerische Lösung der Eigenwertprobleme

Die Lösung der verallgemeinerten Eigenwertprobleme für die Korrelationsmatrizen erfolgt numerisch. Dazu wird zunächst das verallgemeinerte Eigenwertproblem in ein reguläres Eigenwertproblem umgeschrieben. Eine direkte Inversion der Matrix auf der rech-

ten Seite der Gleichung ist jedoch nicht notwendigerweise numerisch stabil. Stattdessen wird die numerisch stabile Cholesky-Zerlegung verwendet. Eine symmetrische, positiv definite Matrix kann in das Produkt einer unteren Dreiecksmatrix L und ihrer Transponierten L^T zerlegt werden, welche numerisch effizient zu invertieren sind [51]. Damit lässt sich das verallgemeinerte Eigenwertproblem (4.41) wie folgt umschreiben,

$$\begin{aligned} C(t)\mathbf{v}^{(n)} &= \lambda^{(n)}(t,t_0)C(t_0)\mathbf{v}^{(n)} \\ \Leftrightarrow C(t)\mathbf{v}^{(n)} &= \lambda^{(n)}(t,t_0)LL^T\mathbf{v}^{(n)} \\ \Leftrightarrow \left(L^{-1}C(t)(L^T)^{-1}\right)L^T\mathbf{v}^{(n)} &= \lambda^{(n)}(t,t_0)L^T\mathbf{v}^{(n)} \end{aligned} \quad (4.54)$$

um ein gewöhnliches Eigenwertproblem für die Matrix $\left(L^{-1}C(t)(L^T)^{-1}\right)$ und die Eigenvektoren $L^T\mathbf{v}^{(n)}$ zu erhalten. Die Eigenwerte beider Eigenwertprobleme sind identisch. Zu Problemen kann es kommen, wenn die zu invertierende Matrix nicht positiv definit ist. Dies kann der Fall sein, wenn Operatoren in der Korrelationsmatrix im Eigenraum beinahe parallel sind und $C(t_0)$ somit sehr kleine Eigenwerte besitzt. Dadurch, und zusätzlich durch die Fehler durch statistische Schwankungen, kann es sein, dass die Matrix singular oder schlecht konditioniert ist. Im zweiten Falle ist die Konditionszahl, welche das Verhältnis zwischen größtem und kleinstem Eigenwert darstellt, so groß, dass ihr Reziprokes die Maschinengenauigkeit erreicht und überschreitet. Für den Datentyp double ist dies bei einer Konditionszahl der Größenordnung 10^{12} der Fall [51].

4.6. Fehleranalyse

Daten, die durch Monte-Carlo-Simulationen gewonnen wurden, sind fehlerbehaftet. Dabei ist zwischen statistischen Fehlern und systematischen Fehlern zu unterscheiden. Systematische Fehler haben dabei mehrere Quellen. Zunächst kommen sie durch die Methode der Gitterdiskretisierung zustande und äußern sich durch Volumen-Effekte, welche durch die Simulation auf einem Gitter mit größerem Volumen verringert werden können, oder durch Diskretisierungsfehler, welche durch eine Verbesserung der auf dem Gitter verwendeten Größen, wie in Kapitel 3.9 gezeigt, verkleinert werden können. Des Weiteren kann es bei der Auswertung der Daten zu systematischen Fehlern kommen, die bei der Massenbestimmung beim Fit an den zeitlichen Verlauf des Korrelators auftreten. Hier spielt die Wahl des Fitintervalles eine entscheidende Rolle, da die Einflüsse von angeregten Zuständen für kleine Zeiten und vom Rauschen für große Zeiten nur schwierig eingeschätzt werden können. Im vorliegenden Fall sind die Bedingungen der Messungen so gewählt, dass die systematischen Fehler kleiner sind als die statistischen Fehler.

Bei der Betrachtung des statistischen Fehlers einer Observablen muss zwischen

primären und sekundären Observablen unterschieden werden. Erstere hängen direkt von den Feldvariablen ab, während sekundäre Observablen Funktionen von gemittelten Feldern sind. Die Werte primärer Observablen \bar{x} werden durch die Mittlung der Werte gewonnen, welche auf den N genutzten Konfigurationen gemessen wurden. Dabei ist \bar{x} lediglich ein Schätzer für den wahren Wert der Größe x und muss daher immer mit seinem statistischen Fehler angegeben werden. Für unkorrelierte Daten gilt

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \quad \hat{\sigma}_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (4.55)$$

mit den auf den einzelnen Konfigurationen gemessenen Werten x_i , dem Mittelwert \bar{x} und der Varianz $\hat{\sigma}_x^2$. Es kann gezeigt werden [11], dass für N unkorrelierte Messungen der Messwert mit seinem Fehler als

$$\bar{x} \pm \sigma \quad \text{mit} \quad \sigma = \frac{\hat{\sigma}_x}{\sqrt{N}} \quad (4.56)$$

angegeben werden muss. Der statistische Fehler sinkt also mit $1/\sqrt{N}$ bei steigender Anzahl der Messungen N .

4.6.1. Autokorrelation

Obige Angaben für den statistischen Fehler einer Messgröße gelten nur für unkorrelierte Daten. Diese liegen bei Monte-Carlo-Simulationen nur selten vor. Aufgrund der Erzeugung der Konfigurationen in einer Markow-Kette, bei der neue Konfigurationen durch eine Änderung der vorhergehenden Konfigurationen erzeugt werden, sind viele Observablen korreliert. Wenn der Fehler für korrelierte Daten nach der obigen Methode bestimmt wird, so wird er unterschätzt. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die erzeugten Konfigurationen der Markow-Kette bereits im Gleichgewicht sind.

Die Autokorrelationsfunktion einer primären Observable x ist durch

$$C_x(\tau) = C_x(x_i, x_{i+\tau}) = \langle x_i x_{i+\tau} \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_{i+\tau} \rangle \quad (4.57)$$

definiert. Dabei ist τ nicht die euklidische, sondern die Monte-Carlo-Zeit, also der Abstand in der Markow-Kette zwischen den Konfigurationen $U^{(i)}$ und $U^{(i+\tau)}$. Die normierte Autokorrelationszeit Γ_x fällt für große τ exponentiell ab. Es gilt

$$\Gamma_x(\tau) \equiv \frac{C_x(\tau)}{C_x(0)} \propto \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_{x,\text{exp}}}\right) \quad (4.58)$$

mit der exponentiellen Autokorrelationszeit $\tau_{x,\text{exp}}$ für die Messgröße x . Die exponentielle

Autokorrelationszeit

$$\tau_{\text{exp}} = \sup_x \tau_{x,\text{exp}} \quad (4.59)$$

ist ein Maß für die Korrelation aufeinanderfolgender Messungen, jedoch in der Praxis schwer zu bestimmen. Einen besseren Anhaltspunkt für die Quantifizierung der Autokorrelation bietet die integrierte Autokorrelationszeit $\tau_{x,\text{int}}$. Diese kann mit der normierten Autokorrelationszeit über

$$\tau_{x,\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{\tau=1}^N \Gamma_x(\tau) \quad (4.60)$$

berechnet werden. Mit Hilfe der integrierten Autokorrelationszeit ist es möglich, die Anzahl der effektiv unabhängigen Messungen über

$$N_{\text{unabh.}} = \frac{N}{2\tau_{x,\text{int}}} \quad (4.61)$$

zu berechnen. Bei der Berechnung des Mittelwertes können dann zwischen zwei berücksichtigten Messwerten $2\tau_{x,\text{int}}$ Konfigurationen übersprungen werden, um ein Resultat aus unkorrelierten Messungen zu erhalten. Alternativ kann der Fehler des Mittelwertes, der, wie oben beschrieben, bei korrelierten Daten als zu gering eingeschätzt wird, durch

$$x \pm \sigma \quad \text{mit} \quad \sigma = \sqrt{\frac{2\tau_{x,\text{int}}\hat{\sigma}_x^2}{N}} \quad (4.62)$$

vergrößert und dadurch korrigiert werden, wenn alle Messungen für die Mittelwertbildung berücksichtigt werden.

Bei der Berechnung der integrierten Autokorrelationszeit für reale Messungen muss die Summierung über die normierten Autokorrelationszeiten bei einem Wert $\tau = W$ abgebrochen werden, da sonst die Beiträge des Rauschens aufsummiert werden und den Wert für die integrierte Autokorrelationszeit erhöhen, obwohl die Beiträge der Autokorrelation wegen des exponentiellen Abfalls bereits vernachlässigbar sind. Die Berechnung erfolgt dann mit

$$\tau_{x,\text{int}}(W) = \frac{1}{2} + \sum_{\tau=1}^{W < N} \Gamma_x(\tau). \quad (4.63)$$

Zur Bestimmung des Abbruchkriteriums gibt es verschiedene Methoden. Die einfachste ist es, die Summe abzubrechen, wenn der Wert von $\Gamma_x(t)$ erstmals negativ wird. Dabei

wird angenommen, dass an diesem Punkt die statistischen Schwankungen überhand nehmen. Eine weitere Methode wurde von Madras und Sokal [52] eingeführt. Hier wird W als kleinste ganze Zahl gewählt, für die

$$W \geq c \tau_{\text{int}}(W) \quad (4.64)$$

gilt. Dabei ist c ein Parameter, der von der Stärke des Abfalls der Autokorrelation abhängt. Bei einem exponentiellen Abfall kann $c = 4$ gewählt werden, für einen langsameren Abfall kann ein Wertebereich zwischen 6 und 10 gewählt werden [23, 52]. Die Varianz der integrierten Autokorrelationszeit kann in diesem Fall mit

$$\sigma^2(\tau_{\text{int}}) \approx \frac{2(2W + 1)}{N} \tau_{\text{int}}^2 \quad (4.65)$$

abgeschätzt werden.

Eine andere Methode wurde von Wolff [53] vorgeschlagen. Dabei wird angenommen, dass der Zusammenhang $\tau_{\text{exp}} \propto S \tau_{\text{int}}$ gilt, wobei S für die meisten Anwendungen im Intervall $[1; 2]$ liegt. Zur Berechnung des optimalen Abbruchwertes W wird die Funktion

$$g(W) = \exp \left[-\frac{W}{\tau'(W)} \right] - \frac{\tau'(W)}{\sqrt{WN}} \quad \text{mit} \quad \tau'(W) = S \ln^{-1} \left(\frac{2\tau_{\text{int}}(W) + 1}{2\tau_{\text{int}}(W) - 1} \right) \quad (4.66)$$

für alle $W = 1, 2, 3, \dots$ berechnet. Der Wert W , für den $g(W)$ sein Vorzeichen wechselt und negativ wird, wird als Abbruchwert gewählt. Die Varianz von τ_{int} bei dieser Methode kann mit

$$\sigma^2(\tau_{\text{int}}) \approx \frac{4}{N} \left(W + \frac{1}{2} - \tau_{\text{int}} \right) \tau_{\text{int}}^2 \quad (4.67)$$

abgeschätzt werden. Hier sollte geprüft werden, ob τ_{int} im Bereich des gewählten W ein Plateau zeigt, anderenfalls muss S verändert werden [53].

4.6.2. Binning

Eine weitere Möglichkeit, den Fehler trotz korrelierter Daten richtig abzuschätzen, ist das sogenannte Binning. Dabei werden die N Konfigurationen in Blöcke aus B aufeinanderfolgenden Konfigurationen, die sogenannten Bins, aufgeteilt. Die Messungen auf den Konfigurationen werden dann innerhalb der einzelnen Bins gemittelt. Die so entstehenden

$$N_B = \frac{N}{B}$$

vielen Mittelwerte werden dann als Resultate einzelner Messungen betrachtet und für die Berechnung des Mittelwerts und der Varianz gemäß (4.55) verwendet. Wenn die Binsgröße B groß genug gewählt wird, sind die Bins unkorreliert und die Fehlerabschätzung ist richtig. Für von $B = 1$ aus steigende Binsgröße steigt die Varianz an, bis sie, von der Größe an, für die die Bins unkorreliert sind, konstant bleibt. Die Binsgröße ist dabei durch die Anzahl der Konfigurationen beschränkt, da bei einer zu großen Binsgröße zu wenig Daten für die Berechnung des Mittelwertes verwendet werden und der statistische Fehler stark ansteigt [12].

Zusätzlich zu den oben genannten Methoden kann auch das Binning-Verfahren für eine Abschätzung der integrierten Autokorrelationszeit genutzt werden. Wenn das Plateau der Varianz erreicht ist und mit $\hat{\sigma}_{x,B}^2$ die Varianz der Binmittelwerte bezeichnet wird, also

$$\hat{\sigma}_B^2 = \frac{1}{N_B - 1} \sum_{i=1}^{N_B} (x_{B,i} - \bar{x})^2 \quad (4.68)$$

gilt, so gilt mit der naiven Varianz $\hat{\sigma}_x^2$ nach (4.55) die Beziehung [54]

$$2\tau_{\text{int}} = B \frac{\hat{\sigma}_B^2}{\hat{\sigma}_x^2}. \quad (4.69)$$

Diese Abschätzung der integrierten Autokorrelationszeit ist nicht so genau wie die Bestimmung über die Autokorrelationsfunktion, ist jedoch leicht implementier- und anwendbar. Der Fehler der Varianz der Binmittelwerte kann nach [55] mit

$$\Delta \hat{\sigma}_B^2 = \sqrt{\frac{2}{N_B - 1}} \hat{\sigma}_B^2 \quad (4.70)$$

abgeschätzt werden. Der Fehler des Fehlers bei dieser Methode wird durch zwei Effekte beeinflusst. Zum einen durch einen systematischen Fehler, der von der Autokorrelationszeit τ abhängt und mit τ/B abfällt, und zum anderen durch einen statistischen Fehler durch die begrenzte Anzahl von Bins, der mit $\sqrt{2B/N}$ ansteigt. Wenn diese Fehler ausbalanciert werden, ergibt sich eine optimale Binsgröße, welche durch

$$B_{\text{opt}} = \tau(2N/\tau)^{1/3} \quad (4.71)$$

berechnet werden kann, wenn eine Abschätzung für τ besteht [53].

4.6.3. Jackknife-Verfahren

Obige Methoden zur Abschätzung der Autokorrelationszeit sind für primäre Observablen anwendbar. Bei sekundären Observablen y ist dies nicht möglich, da der beste Schätzer

für eine sekundäre Observable $\bar{y} = y(\bar{x})$ und nicht $\overline{y(x)}$ ist [12]. Somit stehen nicht N viele sekundäre Observablen für N Konfigurationen zur Verfügung und der Fehler ist nicht über die Varianz zu bestimmen. Mit Hilfe des Jackknife-Verfahrens ist es möglich, den statistischen Fehler der Größe \bar{y} abzuschätzen. Dafür werden bei N Messungen N Mittelwerte gebildet, in denen jeweils der n -te Wert ausgelassen wird:

$$x_n^J = \frac{1}{N-1} \sum_{i \neq n} x_i. \quad (4.72)$$

Die entsprechenden Jackknife-Schätzer für die sekundäre Observable werden dann auf Grundlage dieser Mittelwerte, in denen x_n ausgelassen wurde, bestimmt,

$$y_n^J = y(x_n^J). \quad (4.73)$$

Der entsprechende Mittelwert der sekundären Größe ist dann

$$\bar{y}^J = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N y_n^J \quad (4.74)$$

und die Varianz dieser Größe kann mit

$$(\sigma^J(\bar{y}))^2 = \frac{N-1}{N} \sum_{n=1}^N (y_n^J - \bar{y}^J)^2 \quad (4.75)$$

berechnet werden. Die sekundäre Größe mit ihrem Fehler kann dann mit

$$\bar{y}^J \pm \sigma^J(\bar{y}) \quad (4.76)$$

angegeben werden. Das Jackknife-Verfahren liefert nur für unkorrelierte Daten eine zuverlässige Fehlerabschätzung, weshalb es bei korrelierten Daten mit anderen Methoden, wie beispielsweise mit Binning kombiniert werden muss.

Jackknife-Binning ist eine stabile Methode zur Abschätzung des statistischen Fehlers, hängt jedoch von der Wahl der richtigen Binnengröße ab. Ein neueres Verfahren zur Bestimmung des statistischen Fehlers sekundärer Observablen auf der Grundlage korrelierter primärer Observablen ist die Γ -Methode von Ulli Wolff [53]. Hier wird die Abweichung zwischen Schätzer \bar{y} und wahrer Größe y in erster Ordnung als linearer Zusammenhang betrachtet. Die Anwendung dieser auch Linearisierung genannten Methode ermöglicht neben der Abschätzung des Fehlers auch die Angabe einer Autokorrelationszeit für die betrachteten sekundären Observablen. Die genaue Anwendung auf mit der Variationsmethode bestimmte Massen ist in [23] hergeleitet. Bei kleinen Eigenwerten der Korrelationsmatrix kann es bei der Anwendung der Γ -Methode zu numerischen Instabilitäten bei

der Cholesky-Zerlegung kommen, weshalb hier für die Fehlerabschätzung das Jackknife-Binning gewählt wird. Sandbrink [24] hat für die Massenbestimmung von Gluebällen beobachtet, dass beide Methoden vergleichbare Ergebnisse liefern.

5. Massenbestimmung des Gluino-Glueballes

Die Variationsmethode wurde in der DESY-Münster-Kollaboration bereits verwendet, um das Signal bei der Massenbestimmung für Gluebälle zu verbessern, indem die Kontamination durch angeregte Zustände verringert und somit ein Fit bereits bei kleinen Zeiten ermöglicht wurde [24, 26]. Die Massenbestimmung des Grundzustandes des Gluino-Glueballes hingegen erfolgte durch den direkten Fit an die zeitliche Entwicklung der Korrelationsfunktion. Dennoch wurden auch hier APE- und Jacobi-Smearing verwendet, um den Einfluss angeregter Zustände für kleine Zeiten zu verringern [30, 37].

Ziel dieser Arbeit ist die Bestimmung der Masse des ersten angeregten Zustandes des Gluino-Glueballes in der $\mathcal{N} = 1$ supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie mit der Eichgruppe $SU(2)$. Wie in Abschnitt 4.5 dargelegt, ist die Variationsmethode dazu geeignet, dieses Ziel zu erreichen. Zusätzlich ist, zumindest bei gleicher Statistik, eine Verbesserung der bisherigen Ergebnisse für die Bestimmung des Grundzustandes zu erwarten. Zunächst werden dazu verschiedene verschmierte Operatoren und die aus ihnen zusammengesetzten Korrelationsmatrizen untersucht, um eine optimale Wahl von Operatoren zu finden. Durch diese Vorauswahl kann die notwendige Rechenzeit bei der Messung der Korrelatoren verringert werden. Anschließend erfolgt die Analyse für verschiedene Parameter und ausreichende Statistik. Zunächst wird das verallgemeinerte Eigenwertproblem nach der t-Eigenvektor-Methode mit $t_0 = 0$ gelöst, ein Vergleich mit den anderen Methoden erfolgt für die finalen Parameter der Variationsmethode.

5.1. Einfluss und Optimierung des verwendeten Smearings

Zunächst wird der Einfluss von APE-Smearing auf die Massenbestimmung mittels eines einzelnen Korrelators betrachtet. Dafür wird ein Gitter der Größe $32^3 \times 64$ mit den Parametern $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$ und einem Level Stout-Smearing gemäß (3.45) gewählt. Bei $\epsilon_{\text{APE}} = 0.4$ gemäß (4.25) werden die effektiven Massen nach (4.23) für verschiedene Smearinglevel N_{APE} aufgetragen. In Abbildung 5.1 sind die Massen für den unverschmierten Korrelator und die APE-Levels 2,4,6 und 12 gezeigt. Für alle Korrelato-

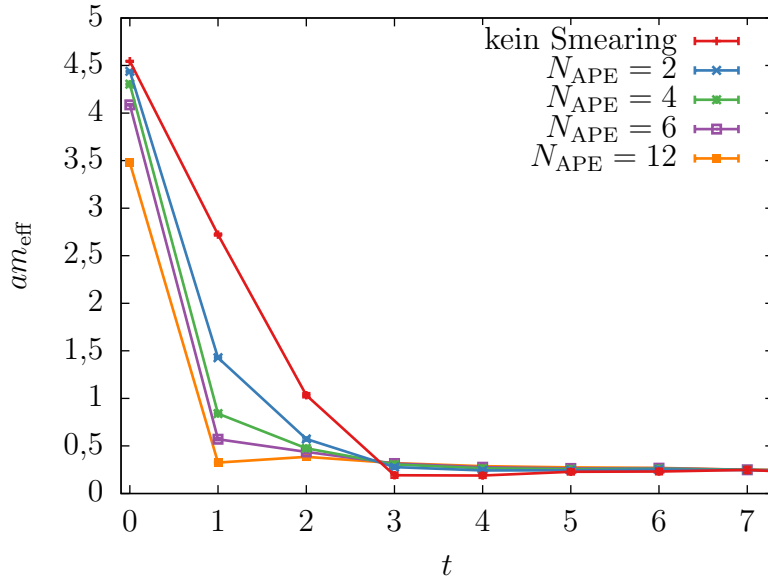


Abbildung 5.1.: Effektive Massen von Korrelatoren mit steigendem N_{APE} und $\epsilon_{\text{APE}} = 0.4$ für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$. Zur besseren Veranschaulichung der Unterschiede sind lediglich kleine Zeiten gezeigt.

ren zeigen die effektiven Massen das erwartete Verhalten: Zunächst fallen die Werte für steigende t ab, bis sie, wenn die Spektralzerlegung (4.20) nur noch vom Grundzustand beeinflusst ist, ein Plateau erreichen. Die verschmierten Korrelatoren erreichen dieses Plateau mit steigendem Smearing schneller. Die Einflüsse angeregter Zustände werden für kleine Zeiten also verringert. Für $N_{\text{APE}} = 12$ ist $m_{\text{eff}}(t = 1) < m_{\text{eff}}(t = 2)$. Dies wäre mit den monoton fallenden Exponentialfunktionen der Spektralzerlegung und ihren positiven Koeffizienten nicht zu erklären. Diese Eigenschaften der Spektralzerlegung beruhen auf der Forderung nach Reflexionspositivität nach Osterwalder und Schrader [56, 57] für die euklidischen Korrelationsfunktionen. Die Reflexionspositivität kann im Falle von Stout-Smearing für $\Delta t = 1$ verletzt sein, womit der negative Ausschlag in der effektiven Masse zu erklären wäre. Der Effekt wird auch später bei der Analyse mittels Variationsmethode sichtbar. Nichtsdestotrotz hat der Ausschlag bei $t = 1$ keinen Einfluss auf die für die Massenbestimmung relevanten zeitlichen Distanzen [30]. Aufgrund dieses Effekts des Smearings werden Fits zur Massenbestimmung stets erst ab $t_{\text{min}} = 2$ gestartet.

Eine ähnliche Analyse ist für das Jacobi-Smearing möglich. Die Ergebnisse für ein Gitter mit $\kappa = 0,14335$ sind in Abbildung 5.2 gezeigt. Hier wurden die APE-Level null, fünf und 15 verwendet und mit den entsprechenden Korrelatoren mit einem Jacobi-Smearing mit den Parametern $N_J = 4$ und $\kappa_J = 0.2$ nach (4.31) verglichen. Der Effekt

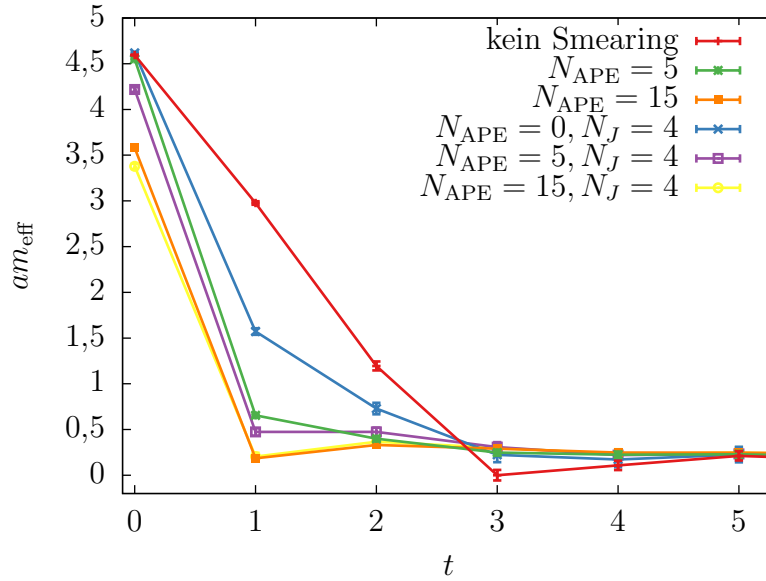


Abbildung 5.2.: Effektive Massen von Korrelatoren mit steigendem N_{APE} mit $\epsilon_{\text{APE}} = 0.4$ und $N_J = 4$ mit $\kappa_J = 0.2$ für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14435$. Zur besseren Veranschaulichung der Unterschiede sind lediglich kleine Zeiten gezeigt.

durch das Jacobi-Smearing entspricht dem des APE-Smearing. Auch hier werden die Einflüsse der angeregten Zustände für kleine Zeiten verringert.

In den Abbildungen 5.1 und 5.2 ist zu erkennen, dass die effektiven Massen aller gezeigten Korrelatoren gegen ein gemeinsames Plateau gehen, welches die Masse des Grundzustandes widerspiegelt. Der nächste Schritt ist die Untersuchung der effektiven Massen, welche aus den Eigenwerten des verallgemeinerten Eigenwertproblems für die Korrelationsmatrix gewonnen werden. Der Verlauf der effektiven Masse für Korrelationsmatrizen aus wenig verschmierten Operatoren ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

Da die Einflüsse von Jacobi- und APE-Smearing auf die Massenbestimmung sich nicht unterscheiden, wird die Analyse auf Korrelatoren mit APE-Smearing beschränkt. Dies ermöglicht eine ausführliche Untersuchung des Einflusses der Anzahl und Auswahl verschiedener APE-verschmierter Korrelatoren zum Aufbau der Korrelationsmatrix. Dazu wird zunächst für $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$ die Messung für eine 21×21 Korrelationsmatrix für eine begrenzte Statistik von 418 Konfigurationen vorgenommen. Die hier präsentierten Ergebnisse beruhen auf Messungen auf 1671 Konfigurationen. Eine Diskussion der Unterschiede zwischen den Analysen mit kleiner und verbesserter Statistik erfolgt im Anschluss. Die Korrelationsmatrix enthält neben dem unverschmierten Korrelator APE-verschmierte Korrelatoren mit dem Abstand $\Delta N_{\text{APE}} = 5$. Die volle gemessene

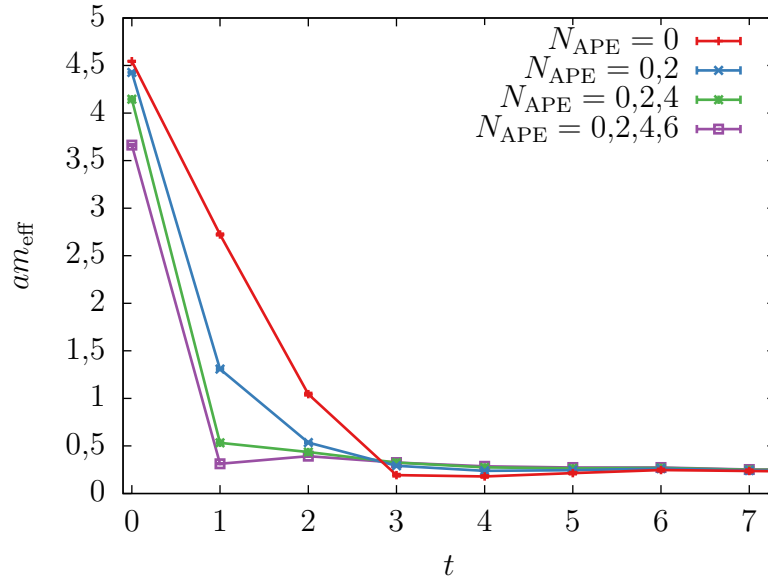


Abbildung 5.3.: Effektive Massen $m_{\text{eff}}^{(1)}(t)$ aus den Eigenwerten der Korrelationsmatrizen aus den mit N_{APE} mit $\epsilon_{\text{APE}} = 0.4$ verschmierten Korrelatoren für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$. Zur besseren Veranschaulichung der Unterschiede sind lediglich kleine Zeiten gezeigt.

Korrelationsmatrix enthält also Korrelatoren der APE-Level

$$N_{\text{APE}} \in \{0, 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60, 65, 70, 75, 80, 85, 90, 95, 100\}.$$

Da die die Anzahl der Operatoren $L/2 = 16$ übersteigt, wird davon ausgegangen, dass eine Analyse der gesamten Matrix mittels Variationsmethode nicht möglich ist, da die Operatoren in der Matrix linear abhängig sind [46]. Daher erfolgt die Auswertung zunächst für Submatrizen steigender Größe, in denen sukzessive der Korrelator mit dem nächstgrößeren Smearinglevel hinzugefügt wird. Da die Massenbestimmung des ersten angeregten Zustandes optimiert werden soll, werden im Folgenden lediglich die effektiven Massen m_{eff}^2 aus den Eigenwerten nach (4.46) betrachtet. Auf der linken Seite von Abb. 5.4 ist in blau die effektive Masse zum Zeitpunkt $t = 3$ für die verschiedenen Größen der sukzessive vergrößerten Matrix aufgetragen. Die Wahl des Zeitpunktes $t = 3$ liegt darin begründet, dass für größere Zeiten die Werte der effektiven Masse bereits anfangen stark zu schwanken und größer werdende Fehler besitzen, während sich bei $t = 2$ noch nicht unbedingt ein Plateau eingestellt hat. Unter der Annahme, dass die effektive Masse zu diesem Zeitpunkt eine erste Näherung für die aus einem Fit gewonnene Masse ist, wird der Verlauf der effektiven Massen untersucht.

In Abb. 5.4 ist zu sehen, dass der Wert der effektiven Masse für eine steigende Größe

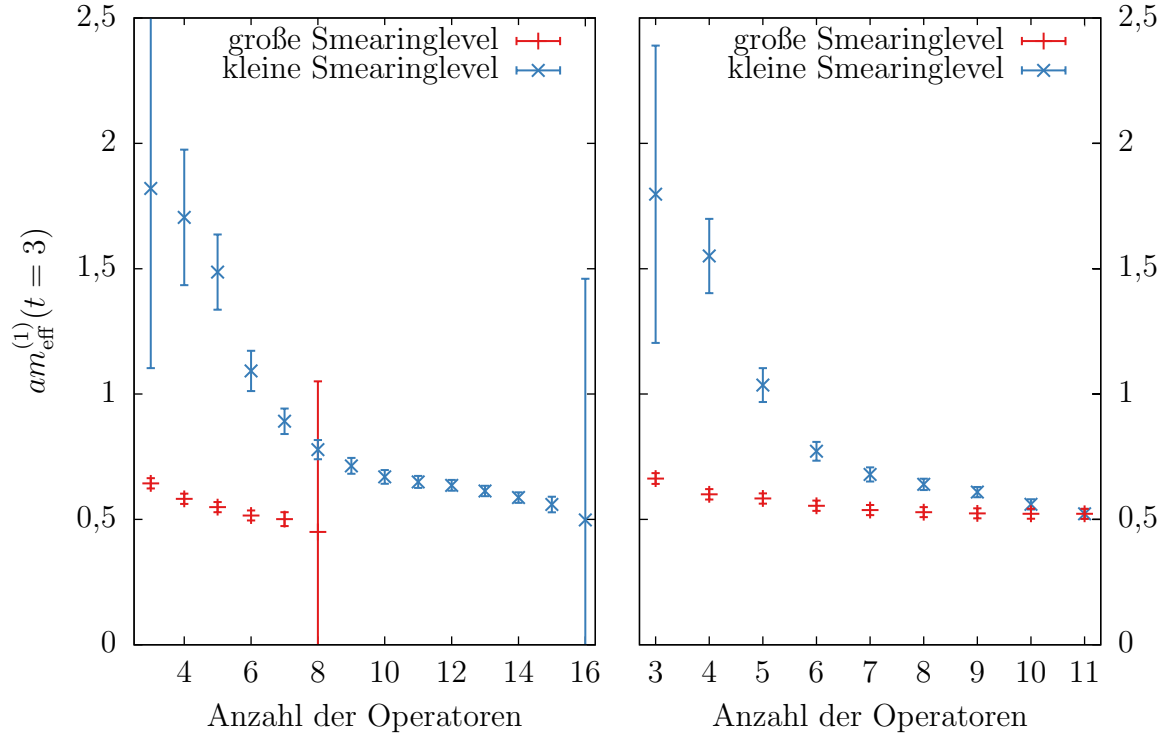


Abbildung 5.4.: Effektive Massen $m_{\text{eff}}^{(2)}(t = 3)$ für verschiedene Größen der Korrelationsmatrix aus verschmierten Operatoren mit *links*: $\Delta N_{APE} = 5$ *rechts*: $\Delta N_{APE} = 10$ und $\epsilon_{APE} = 0.4$ für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$.

der Korrelationsmatrix und damit auch der verwendeten Smearinglevel abnimmt. Es ist davon auszugehen, dass mit steigender Matrixgröße das Plateau eher erreicht wird und somit ein Fit zu früheren Zeiten möglich ist. Gleichzeitig nimmt der Fehler bis zu einer Größe von 14×14 ab und steigt danach leicht wieder an. Bei $N = 16$ ist der Fehler so groß, dass nicht mehr von einer erfolgreichen Massenbestimmung gesprochen werden kann. Für alle größeren Matrizen ist eine Lösung des Eigenwertproblems nicht möglich, da die zu invertierende Matrix schlecht konditioniert ist. Die Aussage von Lüscher und Wolff [46], dass die Operatoren ab $N = L/2$ linear abhängig sind, scheint sich also zu bestätigen. Gleichzeitig ist auch eine Analyse von mindestens 3 Operatoren notwendig, um ein Ergebnis für die Eigenwerte des ersten angeregten Zustandes zu erhalten.

Um die Effekte einer vergrößerten Matrix von denen großer Smearinglevel zu trennen, wird nun eine Auswertung für eine Matrix mit großen N_{APE} vorgenommen. Um gleichzeitig das Vorhandensein von möglichst orthogonalen Operatoren zu gewährleisten, wird hier der Grundzustand mit berücksichtigt. Ausgehend von einer Matrix mit den Smearingleveln $N_{APE} \in \{0, 95, 100\}$ wird nun eine Vergrößerung erreicht, indem Operatoren mit absteigendem N_{APE} hinzugefügt werden. Der Verlauf der effektiven Masse für dieses

Verfahren ist in rot ebenfalls auf der linken Seite von Abbildung 5.4 zu sehen. Bereits für das minimale Set von 3 Operatoren ist die Masse im Vergleich zum vorherigen Fall deutlich verringert und hat einen kleinen Fehler. Nichtsdestotrotz sinkt auch hier die Masse bei einer Vergrößerung der Matrix weiter ab. Der Fall von linear abhängigen Operatoren scheint hier bereits bei acht Operatoren erreicht. Dies lässt darauf schließen, dass sich die Operatoren bei großen N_{APE} weniger stark unterscheiden als dies bei kleinen N_{APE} der Fall ist. Trotzdem ist die effektive Masse hier kleiner als im Falle kleinerer Smearinglevel, während der Fehler vergleichbar ist.

Um trotz der Begrenzung der Größe der Matrix die volle Spanne der gemessenen Operatoren untersuchen zu können, wird obige Analyse für sukzessive vergrößerte Matrizen erneut vorgenommen, wobei für den Abstand der Smearinglevel nun $\Delta N_{\text{APE}} = 10$ gewählt wird. Eine Ausnahme bildet hier das erste verschmierte Level, für das $N_{\text{APE}} = 5$ gewählt wird. Die volle Größe der Matrix, die bei beiden Methoden erreicht wird, ist also 11×11 , sie enthält die Level

$$N_{\text{APE}} \in \{0, 5, 15, 25, 35, 45, 55, 65, 75, 85, 95\}. \quad (5.1)$$

Das Ergebnis der erneuten Auswertung ist auf der rechten Seite von Abbildung 5.4 dargestellt. Qualitativ bestätigt sich das Verhalten aus der vorherigen Analyse. Bei steigendem N_{APE} wird der niedrigste Wert für die effektive Masse hier erst bei der vollständigen Größe der Matrix erreicht. Die Masse erreicht bei kleinerem Fehler einen geringeren Wert als die beste Abschätzung, die mittels der vorher betrachteten 15×15 -Matrix gewonnen werden konnte. Dies lässt darauf schließen, dass die Verwendung der Operatoren mit $N_{\text{APE}} > 70$ die Qualität der Massenbestimmung verbessert. Die Tatsache, dass sich im Falle des Hinzufügens von Operatoren mit $N_{\text{APE}} < 45$ keine signifikante Veränderung der Massen ergibt, zeigt, dass diese Operatoren für die Extraktion der zweitgrößten Eigenwerte $\lambda^{(2)}(t, t_0 = 0)$ nicht mehr entscheidend sind.

Eine Untersuchung des Beitrags der einzelnen Operatoren lässt sich auch anhand der Eigenvektoren des Eigenwertproblems vornehmen. Dafür wird hier exemplarisch der normierte Eigenvektor für die Matrix mit Operatoren der Level $N_{\text{APE}} \in \{0, 45, 55, 65, 75, 85, 95\}$

$$\mathbf{v}^2 = (1,8 \cdot 10^{-7}; -0,015; 0,125; -0,420; 0,688; -0,552; 0,174)^T \quad (5.2)$$

mit dem der vollständigen Matrix nach (5.1)

$$\mathbf{v}^2 = (4,0 \cdot 10^{-8}; 1,7 \cdot 10^{-6}; -9,0 \cdot 10^{-5}; 0,002; -0,016; 0,088; -0,284; 0,557; -0,648; 0,410; -0,108)^T \quad (5.3)$$

verglichen, wobei wie oben $t = 3$ gewählt ist. Im ersten Vektor ist zu sehen, dass der unverschmierte Operator, dessen Beitrag durch den ersten Eintrag gekennzeichnet ist, nicht signifikant zum Eigenwert $\lambda^{(2)}$ beiträgt. Stattdessen haben die Operatoren mit den Smearingleveln $N_{\text{APE}} = 65,75$ und 85 den größten Beitrag. Dies bestätigt die Aussage, die aus der Untersuchung der effektiven Masse gewonnen werden konnte. Wie dies für den Grundzustand erwartet wurde, gilt auch für den ersten angeregten Zustand, dass die lokalen Operatoren mit wenig Smearing weniger Überlapp mit der physikalischen Wellenfunktion haben. Zum Vergleich ist der Eigenvektor für $\lambda^{(1)}(t = 3, t_0 = 0)$ dargestellt:

$$\mathbf{v}^1 = (-4,3 \cdot 10^{-7}; 6,2 \cdot 10^{-6}; 2,3 \cdot 10^{-5}; 5,1 \cdot 10^{-5}; -1,2 \cdot 10^{-4}; -3,4 \cdot 10^{-4}; -1,2 \cdot 10^{-4}; -0,005; -0,021; -0,122; -0,992)^T. \quad (5.4)$$

Hier hat der Operator mit dem größten Smearinglevel eindeutig den größten Effekt auf den Eigenwert, alle anderen Operatoren tragen nur marginal bei. Für $\lambda^{(2)}$ lässt sich der Schluss ziehen, dass ein noch größeres Smearing nicht zur Verbesserung der Massenbestimmung führt, das Optimum scheint zwischen $N_{\text{APE}} = 65$ und $N_{\text{APE}} = 85$ erreicht zu werden.

Die ursprüngliche Analyse wurde anhand von Messergebnissen von 418 Konfigurationen vorgenommen. Obwohl die grundlegenden Ergebnisse dieselben sind, ergeben sich Unterschiede zu der hier vorgenommenen Analyse der Daten von 1671 Konfigurationen, die über die reine Verbesserung der Fehler hinausgehen. Die Analyse der Matrix, welche durch das Hinzufügen von Operatoren kleiner werdender Smearinglevel im Abstand $\Delta N_{\text{APE}} = 5$ vergrößert wird, führt bei kleinerer Statistik nicht bereits bei acht, sondern erst bei 14 Operatoren zu stark vergrößerten Fehlerbalken. Erst bei 17 Operatoren ist eine Inversion nicht mehr möglich. Durch die kleinere Statistik scheint die lineare Abhängigkeit der Operatoren, welche in obiger Analyse eine Vergrößerung der Matrix verhinderte, durch die größeren Fehler der Messungen noch nicht zu Tage zu treten. Dies lässt darauf schließen, dass bei einer noch besseren Statistik auch für kleinere Matrixgrößen Probleme auftreten können. Daher erscheint die Wahl von $\Delta N_{\text{APE}} = 10$ für weitere Messungen angebracht. Für die mit $\Delta N_{\text{APE}} = 10$ konstruierte Matrix zeigen sich keine solche Auswirkungen. Nichtsdestotrotz sollte auch hier nicht die kleinstmögliche Matrix, welche ein gutes Ergebnis für die Massenbestimmung liefert, gewählt werden. Für den Fall, dass sich herausstellt, dass auch hier bei steigender Statistik Probleme bei der Lösung des Eigenwertproblems auftreten, erscheint es ratsam, auch Operatoren kleinerer Smearinglevel mit in die Matrix einzubeziehen. Für alle weiteren Messungen bei $\beta = 1,9$ werden die in (5.1) gewählten Operatoren verwendet.

5.2. Massenfits

Wie in Kapitel 4.3 erläutert, stellt die effektive Masse nur einen Anhaltspunkt für die Masse eines Zustandes dar. Zu einem Zeitpunkt t beinhaltet sie lediglich die Informationen der Korrelationsfunktion beziehungsweise des Eigenwertes des verallgemeinerten Eigenwertproblems zu den beiden Zeitpunkten t und $t + 1$. Prinzipiell ist es möglich, die Informationen weiterer Zeiten zu integrieren, indem ein mit den Fehlern der effektiven Massen gewichteter Mittelwert über die effektiven Massen in einem Plateau vorgenommen wird. Ohne den Umweg über die effektiven Massen ist allerdings auch ein direkter Exponentialfit möglich.

Im Folgenden wird lediglich die Massenbestimmung anhand der Eigenwerte der Korrelationsmatrix betrachtet. Diese Eigenwerte $\lambda^{(n)}$ fallen, wie in (4.45) gezeigt, abhängig von der Masse exponentiell mit der Zeit ab. Da das Eigenwertproblem lediglich für eine endliche Korrelationsmatrix gelöst werden kann, sind weitere, exponentiell abfallende Störungen zu erwarten. Die Herausforderung beim Fit liegt nun darin, ein möglichst großes Fitintervall zu finden, in dem die Einflüsse durch andere Zustände und die statistischen Fehler klein genug sind, so dass ein zuverlässiger Wert für die Masse extrahiert werden kann. Der Fit erfolgt nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate (siehe zum Beispiel [58]) mit Hilfe der *GNU Scientific Library* [59]. Die Qualität kann dabei mittels des Parameters χ^2 beurteilt werden. Dieser stellt die Summe der gewichteten Fehlerquadrate dar, wobei in der Analyse stets die Berücksichtigung der Korrelation zwischen den Messwerten der Eigenwerte erfolgt. Das reduzierte χ^2 ist für K Freiheitsgrade beim Fit als

$$\chi_{\text{red}}^2 = \frac{\chi^2}{K} \quad (5.5)$$

definiert. Für $\chi_{\text{red}}^2 \gg 1$ wird ein Fit als schlecht angesehen, die Abweichungen zwischen Daten und Fitfunktion ist zu groß. Für $\chi_{\text{red}}^2 \ll 1$ ist der Fit zu gut. In diesem Fall verringern die Fehler der Daten das χ^2 zu stark. Erstrebenswert ist also ein Wert von $\chi_{\text{red}}^2 \approx 1$ [60]. Der Fehler der Fitparameter eines Fits kann mittels Kovarianzmatrix bestimmt werden. Um die statistischen Fehler angemessen zu berücksichtigen, erfolgt in dieser Arbeit die Bestimmung der Fehler mittels Jackknife-Verfahren, diese Fehler sind stets größer als die aus dem Fit extrahierten.

5.2.1. Automatisierte Massenbestimmung

Das χ_{red}^2 -Kriterium ist meist nicht ausreichend, um aus einer Vielzahl an unterschiedlichen Fitintervallen und -ergebnissen das beste zu bestimmen. Erstrebenswert ist eine automatisierte Auswahl des besten Fitintervalls, um eine Beeinflussung des Ergebnis-

ses und ein daraus folgendes Bias bei der Auswertung zu verhindern. Die automatische Auswahl eines Fitintervalls wurde in dieser Arbeit durch die Anwendung eines von Cais et al. [61] für die Projektionsmethode eingeführten *fitting robot* vorgenommen. Der Algorithmus basiert auf drei Axiomen:

1. Ein akzeptabler Fit muss ein χ_{red}^2 besitzen, das kleiner als ein definierter Maximalwert ist.
2. Das Fitintervall wird so groß wie möglich gewählt.
3. Kleine Startzeiten des Intervalls werden bevorzugt.

Durch das erste Axiom wird das oben beschriebene Kriterium für einen guten Fit implementiert. In der Praxis wird hier $\chi_{\text{red}}^2 < 1,1$ gewählt. Die Tatsache, dass keine untere Schranke angegeben werden muss, hängt direkt mit dem zweiten Axiom zusammen. Das Signal-Rausch-Verhältnis der Eigenwerte des verallgemeinerten Eigenwertproblems nimmt mit steigendem zeitlichen Abstand zu, weshalb es sinnvoll erscheint, nur Eigenwerte bis zu einer bestimmten Grenze in den Fit einzubeziehen. Eigenwerte mit großem Fehler verringern den Wert für $\chi_{\text{red}}^2 < 1,1$ künstlich, ohne den Fit zu verbessern. Alle Eigenwerte, für die der relative Fehler größer als 50% ist, werden daher nicht berücksichtigt. Dies führt zu einer oberen Schranke t_{max} für das Fitintervall. Da das Signal-Rausch-Verhältnis ab- und der Fehler der Eigenwerte damit zunimmt, beschränken die Eigenwerte bei kleinen Zeiten den Fit am meisten. Um die volle Genauigkeit der Daten nutzen zu können, ist es also sinnvoll, diese Eigenwerte in den Fit mit einzubeziehen und somit nach dem dritten Axiom kleine Startzeiten t_{min} zu bevorzugen.

Die praktische Umsetzung eines Fits anhand obiger Axiome kann in verschiedenen Varianten erfolgen. Nachfolgend werden die beiden Verfahren, wie sie in [61] beziehungsweise [50] und [62] eingeführt werden, erläutert und in ihrer Anwendung verglichen. In beiden Fällen wird anhand der Fehler der Eigenwerte zunächst eine obere Grenze t_{max} festgelegt. Die untere Grenze t_{min} wird so klein wie möglich gewählt, dabei werden durch Kontaktterme oder Stout-Smearing beeinträchtigte Zeitscheiben ausgeschlossen. Nun erfolgt ein Fit im so festgelegten maximalen Fitintervall. Wenn dieser nicht das χ_{red}^2 -Kriterium erfüllt, muss das Intervall verringert werden. In der Art und Weise, wie nun das maximale Intervall $[t_{\text{min}}; t_{\text{max}}]$ durch kleinere Fitintervalle abgedeckt wird, unterscheiden sich die beiden Methoden. In der ersten Methode wird das Intervall um eine Zeiteinheit verkleinert. Anschließend erfolgt ein Fit beginnend von t_{min} . Ist dieser nicht erfolgreich, wird die Startzeit nach und nach um eins erhöht, bis die obere Grenze des Intervalls t_{max} erreicht ist. Ist nun wieder kein akzeptabler Fit gelungen, wird das Intervall wiederum verkleinert. Bei dieser Methode ist ein großes Fitintervall also wichtiger als eine möglichst kleine Startzeit. Bei der anderen Variante wird t_{min} als Startzeit

für den Fit festgehalten und die Intervalllänge nach und nach verringert, bis entweder ein Fit akzeptiert oder eine vorher definierte kleinste Intervalllänge erreicht ist. Wenn letzteres geschieht, wird die Startzeit vergrößert und es werden erneut Fits mit kleiner werdender Intervalllänge vorgenommen. Die geforderte Mindestlänge kann vom Problem abhängen. So kann zum Beispiel für die Massenbestimmung des Grundzustandes eine größere Mindestlänge als bei angeregten Zuständen gefordert werden. In dieser Methode wird das dritte Axiom, die Bevorzugung kleiner Startzeiten, als wichtiger angesehen als die Maximierung der Intervalllänge.

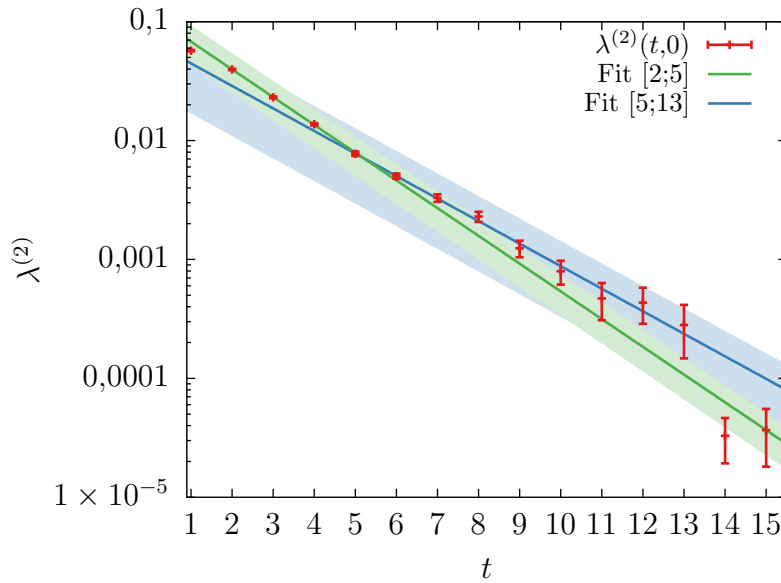


Abbildung 5.5.: Eigenwerte $\lambda^{(2)}(t, t_0 = 0)$ und Exponentialfits für verschiedene Intervalle in logarithmischer Skala für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$.

Wenn die beiden Methoden verschiedene Fitintervalle liefern, sollte bei der Massenbestimmung für mehrere Parameter β und κ eine der beiden Methoden für alle Parameterkombinationen ausgewählt werden, damit eine Beeinflussung des Ergebnisses durch die Auswertung ausgeschlossen werden kann. Bei der Massenbestimmung des angeregten Zustandes des Gluino-Glueballes mit dem Korrelator C_1 ergibt sich lediglich für die Kombination $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$ auf einem $32^3 \times 64$ -Gitter und 1671 Konfigurationen eine Differenz zwischen beiden Methoden, weshalb dieser Fall hier veranschaulicht wird. Die Eigenwerte $\lambda^{(2)}(t)$ sind in Abbildung 5.5 bis zu $t_{\max} = 15$ aufgetragen. Wird nun der fitting robot zur Bestimmung der Masse verwendet, liefert die erste Variante, welche das Fitintervall maximiert, einen Fit im Intervall $[5; 13]$ mit der Masse $am' = 0.437(28)$. Mit der zweiten Variante des robots hingegen wird die Masse durch einen Fit im Intervall $[2; 5]$ die Masse $am'' = 0.537(9)$. Die entsprechenden Exponentialfunktionen mit

ihren Fehlern, wie sie anhand eines Fits an die Mittelwerte der Eigenwerte und nicht mit dem Jackknife-Verfahren berechnet werden, sind ebenfalls in Abbildung 5.5 gezeigt. Die Übereinstimmung mit den Eigenwerten in den jeweiligen Fitbereichen ist klar ersichtlich. Um eine konsistente Massenbestimmung für diesen und andere Werte von κ zu ermöglichen, muss eine Entscheidung getroffen werden, welche der beiden Methoden eine bessere Abschätzung für die Masse liefert. Für diese Entscheidung kann auch die effektive Masse herangezogen werden. Diese ist, zusammen mit den beiden Massen am' und am'' und ihren Jackknife-Fehlern, in Abbildung 5.6 gezeigt. Der Verlauf der effektiven Masse zeigt klar, warum die beiden verschiedenen Verfahren unterschiedliche Intervalle auswählen. Ein erstes Plateau ist bereits ab $t = 2$ zu erkennen, es erstreckt sich jedoch nur bis $t = 4$. Ab $t = 5$ scheint sich ein weiteres, nach unten verschobenes Intervall zu formen. Entscheidend für die Wahl einer Methode ist nun, dass das erste Plateau bereits ab dem ersten zuverlässig verwendbaren Wert $t = 2$ gebildet wird und nicht erst ein Abfall zu einem Plateau stattfindet. Es gibt also keinen Grund, die Punkte mit dem besten Signal-Rausch-Verhältnis aus dem Fit auszuschließen, weshalb hier die zweite Variante, also der Fit im Intervall $[2; 5]$, gewählt wird.

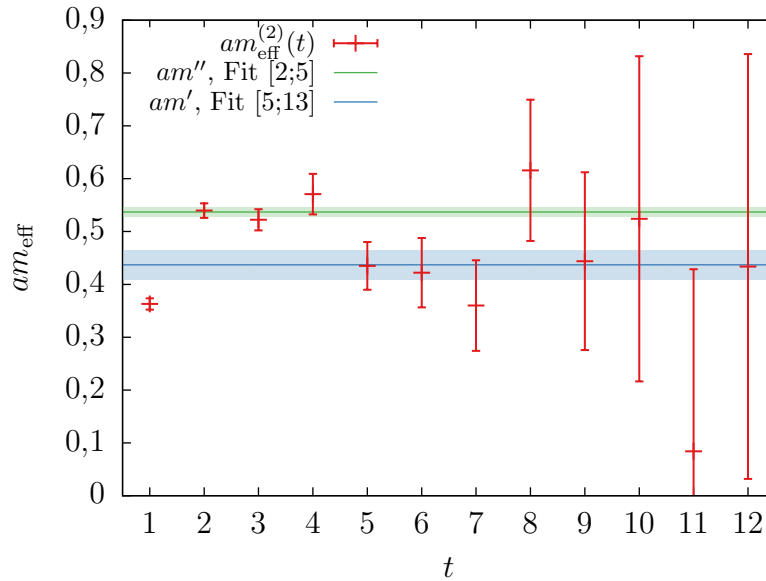


Abbildung 5.6.: Effektive Massen $m_{\text{eff}}^{(2)}(t)$ und aus Exponentialfits bestimmte Massen für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$.

5.3. Fehlerabschätzung und Autokorrelation

Neben der Bestimmung eines Wertes für die Masse ist die Abschätzung des mit dem Wert verknüpften Fehlers von entscheidender Bedeutung. Die statistischen Fehler f_{stat}

der durch die Fits extrahierten Massen werden mittels des in Abschnitt 4.6.3 vorgestellten Jackknife-Verfahrens bestimmt. Die systematischen Fehler f_{sys} der Massenbestimmung mittels Exponentialfits haben ihren Ursprung in der Auswahl des Fitintervalls. Durch die Anwendung der automatisierten Auswahl wird versucht, diesen Fehler zu minimieren. Dennoch muss davon ausgegangen werden, dass die extrahierten Massen mit einem systematischen Fehler behaftet sind. Sandbrink [24] hat verschiedene Ansätze für die Abschätzung des durch die Auswahl eines bestimmten Fitintervalls zustande kommenden systematischen Fehlers vorgestellt. Für diese Arbeit wird für den systematischen Fehler die maximale Differenz zu benachbarten, durch Fits derselben Intervalllänge extrahierten Massen der Form

$$f_{\text{sys}} = \max \{|m_{\text{fit}}(t) - m_{\text{fit}}(t+1)|, |m_{\text{fit}}(t) - m_{\text{fit}}(t-1)|\} \quad (5.6)$$

gewählt. Dabei werden Fits für $t < t_{\text{min}}$ oder einer oberen Intervallgrenze, welche über t_{max} hinausgeht, nicht berücksichtigt. Der Gesamtfehler f kann über

$$f = \sqrt{f_{\text{stat}}^2 + f_{\text{sys}}^2} \quad (5.7)$$

berechnet werden. Die einzelnen Fehler werden in der Reihenfolge $(f_{\text{stat}})(f_{\text{sys}})$ angegeben.

Wie in Kapitel 4.6 erläutert, ist die Beachtung einer möglichen Autokorrelation entscheidend für die angemessene Einschätzung eines statistischen Fehlers. Die verwendeten primären Observablen sind die Einträge der Korrelationsmatrix $C_{ij}(t)$. Eine Analyse dieser Einträge mittels der in Abschnitt 4.6.1 aufgeführten Methoden zeigt, dass die einzelnen Einträge korreliert sind, dabei nimmt die Korrelation mit steigendem Smearing zu. Eine Quantifizierung der Autokorrelationszeiten ist aufgrund der kleinen Statistik nicht zuverlässig möglich, es kann jedoch der Schluss gezogen werden, dass auch für die sekundären Observablen Autokorrelation zu erwarten ist. Für die hier untersuchten Werte von κ stehen jeweils 10 000 beziehungsweise 20 000 Konfigurationen zur Verfügung. Da die Inversion der Fermionmatrix bei der Messung der Einträge der Korrelationsmatrix numerisch aufwändig ist, ist es nicht möglich, auf allen vorhandenen Konfigurationen Messungen vorzunehmen. Um möglichst unkorrelierte Messergebnisse zu erhalten, werden die Messungen daher mit einer Schrittweite s in Monte-Carlo-Zeit vorgenommen, die so gewählt wird, dass die volle Spannweite der vorhandenen Konfigurationen ausgenutzt werden kann. Für $\kappa = 0,14435$ erfolgen die Messungen mit $s = 8$. Anhand von Jackknife-Binning und der Untersuchung der Varianz für steigende Bingröße kann nach (4.69) eine Abschätzung für die integrierte Autokorrelationszeit getroffen werden. Anschließend ist die Bestimmung einer optimalen Bingröße nach (4.71) möglich. In Abbildung 5.7 ist die Abschätzung für τ_{int} mit dem Fehler nach (4.70) für die Massenfits für $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$ aufgetragen. Trotz der bereits gewählten Schrittweite ist erkennbar, dass

Tabelle 5.1.: Übersicht über die aus dem Jackknife-Binning abgeschätzten Autokorrelationszeiten und optimalen Bingrößen für $\kappa = 0,14435$. Die hier angegebene integrierte Autokorrelationszeit τ_{int} bezieht sich auf die betrachteten Konfigurationen mit der Schrittweite s . Bezüglich aller Konfigurationen wäre τ_{int} in etwa um einen Faktor $s = 8$ größer.

Observable		τ_{int}	B_{opt}
C_1	$m^{(1)}$	2.1(6)	22
	$m^{(2)}$	1.1(3)	13
C_{γ_4}	$m^{(1)}$	2.1(6)	22
	$m^{(2)}$	0,9(2)	12

die Daten korreliert sind und Binning zur richtigen Bestimmung des statistischen Fehlers verwendet werden muss. Die integrierte Autokorrelationszeit der Grundzustandsmasse $m^{(1)}$ ist hier in etwa doppelt so groß wie die von $m^{(2)}$. Dies kann daran liegen, dass der Eigenwert des Grundzustandes, wie im Vergleich der Eigenvektoren gezeigt, vor allem vom Operator mit dem größten Smearinglevel beeinflusst wird. Dieser Operator hat die größte räumliche Ausdehnung auf dem Gitter, weshalb es plausibel ist, dass er auch am stärksten korreliert ist. Die Tendenz der Zunahme der integrierten Autokorrelationszeit der Einträge der Korrelationsmatrix bei der Vergrößerung des Smearinglevels kann mittels Binning qualitativ bestätigt werden.

Für $\kappa = 0,14435$ erfolgt zusätzlich der Vergleich mit der Γ -Methode. Hier zeigt sich, dass für die gewählten Bingrößen der Jackknife-Fehler mit dem der Γ -Methode übereinstimmt. Des Weiteren ist zu erkennen, dass die Autokorrelationszeit für die Massenfits mit steigender Intervalllänge zunimmt. Durch den Vergleich beider Methoden kann darauf geschlossen werden, dass die mittels Jackknife-Binning bestimmten statistischen Fehler nicht unterschätzt werden und diese stabilere Methode für alle weiteren Massenfits verwendet werden kann.

5.4. Resultate für $\beta = 1,9$

Für die Bestimmung der Massen im supersymmetrischen Limes ist es zunächst notwendig, für die verwendeten Werte von β eine Extrapolation der für verschiedene κ extrahierten Werte zum Limes der verschwindenden Gluinomasse vorzunehmen. Dafür erfolgen zunächst Messungen für $\beta = 1,9$ mit den in (5.1) gewählten Operatoren. Für diesen Wert von β liegen viele Konfigurationen vor, gleichzeitig entspricht er der Kopplung, welche dem Kontinuumsimes am nächsten ist. Um die vorhandenen Konfigurationen mit der verfügbaren Rechenzeit optimal nutzen zu können und gleichzeitig die Autokorrelation

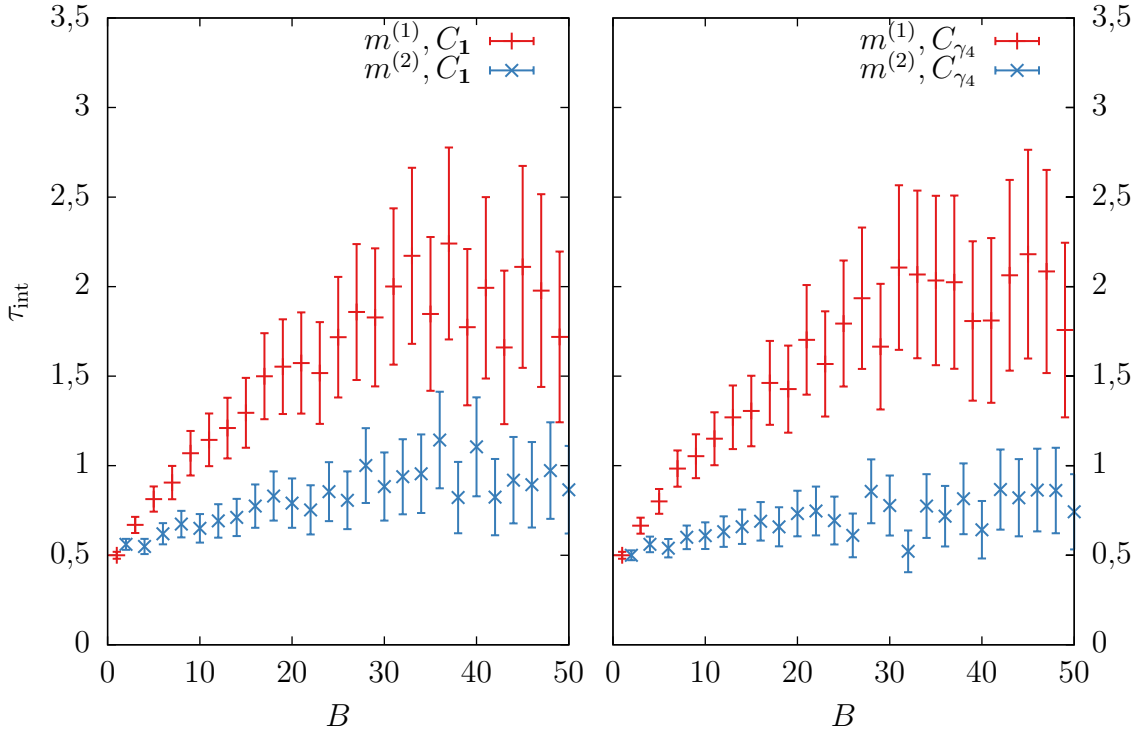


Abbildung 5.7.: Integrierte Autokorrelationszeit nach (4.69) für die beiden Massen $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$ auf Grundlage der Korrelatoren C_1 und C_{γ_4} für $\kappa = 0,14435$.

zu verringern, erfolgen die Messungen mit einer Schrittgröße s in Monte-Carlo-Zeit. Pro κ werden N_{confs} -viele Messungen vorgenommen.

5.4.1. Korrelator C_1

Die Massenbestimmung erfolgt zunächst mit dem in den bisherigen Untersuchungen verwendeten Korrelator C_1 . Die aus den Eigenwerten extrahierten effektiven Massen und die gefitteten Massenplateaus sind in den Abbildungen 5.8 bis 5.10 gezeigt. Tabelle 5.2 führt die gefitteten Massen für die verschiedenen Werte von κ auf. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Massenbestimmung für die angeregten Zustände. Mit dem Operator C_1 ist lediglich für $m^{(2)}$ eine zuverlässige Massenbestimmung möglich, für alle kleineren Eigenwerte sind die Fluktuationen und Fehler zu groß. Die ermittelten Massen für die drei verschiedenen Werte von κ können zur Extrapolation zum Punkt verschwindender Gluinomassen verwendet werden, diese Extrapolation ist in Abbildung 5.14 gezeigt. Dabei wird angenommen, dass das Massenquadrat des adjungierten Pions $a\text{-}\pi$ linear mit der Gluinomasse abfällt, $m_g \propto m_{a\text{-}\pi}^2$ [33]. Dadurch ist eine Extrapolation in Gittereinheiten a möglich und die Massen $am^{(n)}$ können gegen die quadrierte Pionmasse $(am_{a\text{-}\pi})^2$ aufgetragen werden [26]. Für den ersten angeregten Zustand ergibt sich $am^{(2)}(\kappa_c) = 0,439(34)$.

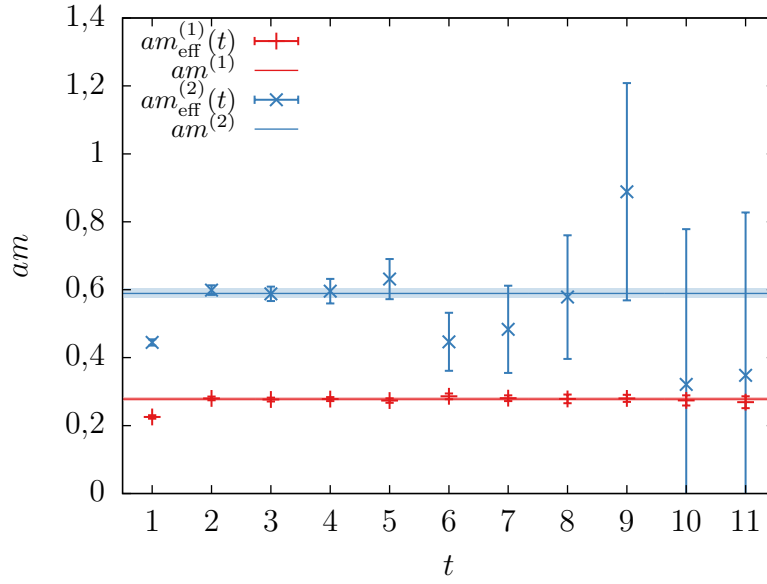


Abbildung 5.8.: Effektive und aus Exponentialfits bestimmte Massen für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14387$.

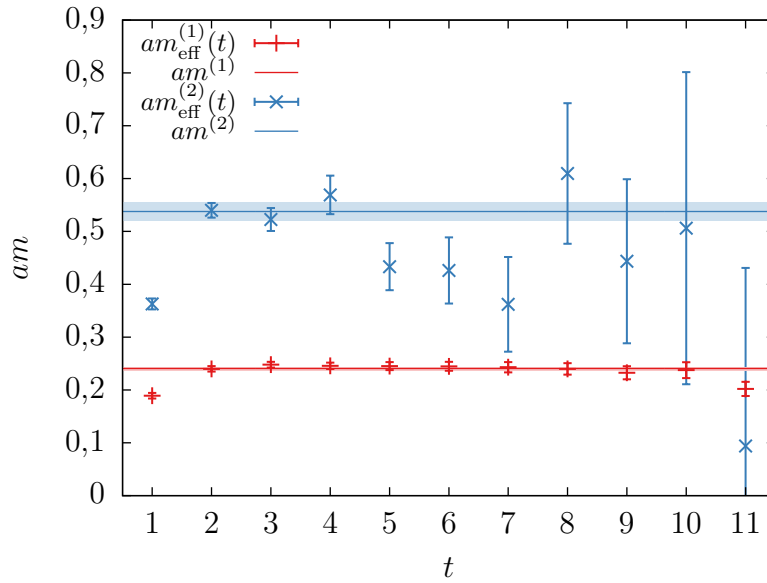


Abbildung 5.9.: Effektive und aus Exponentialfits bestimmte Massen für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$.

Zusätzlich zur Bestimmung von $m^{(2)}$ ist durch die Variationsmethode und die Berücksichtigung verschiedener Operatoren eine Verkleinerung der Fehler der bisherigen Werte für $m^{(1)}$ aus [26] möglich. Dabei werden für alle Werte von κ Intervalllängen, welche größer als 20 sind, verwendet. Da alle Korrelatoren vor der Analyse antisym-

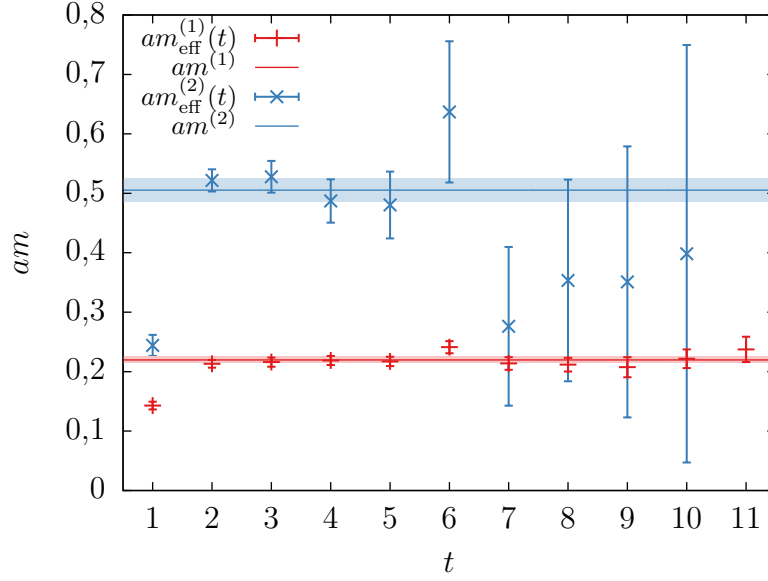


Abbildung 5.10.: Effektive und aus Exponentialfits bestimmte Massen für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14435$.

metrisiert wurden, entspricht dies Fits über einen großen Anteil der vollen verfügbaren euklidische Zeit $T/2$. Im Vergleich zur relativ kleinen Anzahl an verwendeten Konfigurationen N_{confs} sind die Messungen für die aus [26] stammenden Werte auf mehr als acht mal so vielen Konfigurationen erfolgt, dabei wurden die Massen jedoch nur durch den direkten Fit an die Korrelationsfunktion ohne Verwendung der Variationsmethode bestimmt. Die Extrapolation zum Limes $m_g = 0$ für $m^{(1)}$ ist in Abbildung 5.15 gezeigt. Hierbei wurde zusätzlich zu den in Tabelle 5.2 gezeigten Werten der Wert $am^{(1)}(\kappa = 0,1433) = 0,324(11)$ aus [26] verwendet, welcher durch den direkten Fit an den Korrelator bestimmt wurde. Mit diesen vier Werten bei verschiedenen κ ergibt sich für die extrapolierte Masse in Gittereinheiten $am^{(1)}(\kappa_c) = 0,185(7)$.

Tabelle 5.2.: Extrahierte Massen für C_1 mit $\beta = 1,9$ auf einem $32^3 \times 64$ -Gitter, gemessen auf N_{confs} Konfigurationen mit der Entfernung s in Monte-Carlo-Zeit. Wird die Extrapolation ohne $\kappa = 0,1433$ durchgeführt, ergibt sich $am^{(1)}(\kappa_c) = 0,174(8)$

κ	N_{confs}	s	$am^{(1)}$	$am^{(2)}$
0,14387	1276	8	0,2781(39)(31)	0,589(12)(7)
0,14415	1671	12	0,2405(34)(3)	0,538(10)(15)
0,14435	1343	8	0,2197(52)(6)	0,505(17)(11)
κ_c	-	-	0,185(7)	0,439(34)

5.4.2. Korrelator C_{γ_4}

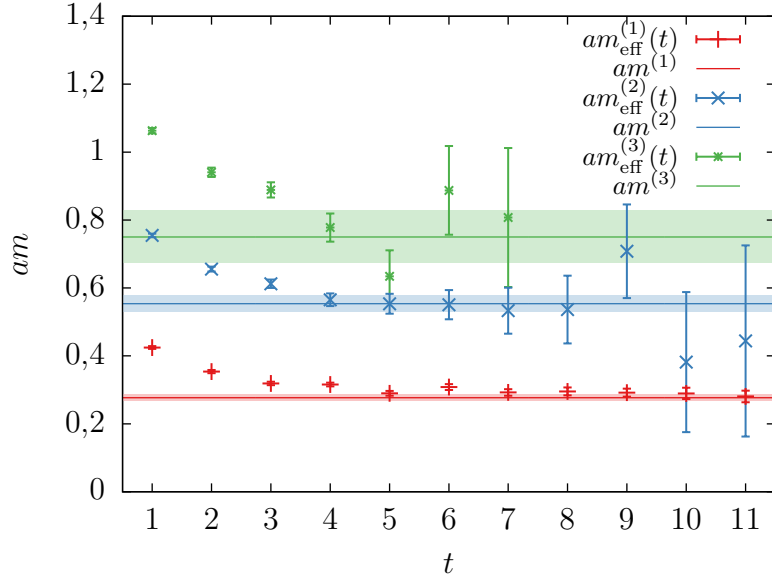


Abbildung 5.11.: Effektive und aus Exponentialfits bestimmte Massen für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14387$.

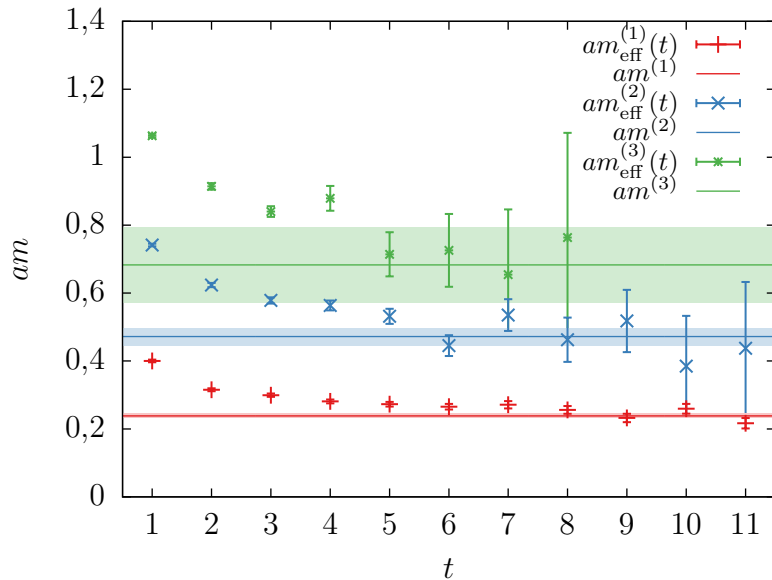


Abbildung 5.12.: Effektive und aus Exponentialfits bestimmte Massen für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14415$.

Wie in Kapitel 3.10 eingeführt, kann der Korrelator des Gluino-Glueballes in die beiden Anteile C_1 und C_{γ_4} aufgeteilt werden. Beide Korrelatoren lieferten in der Vergangenheit

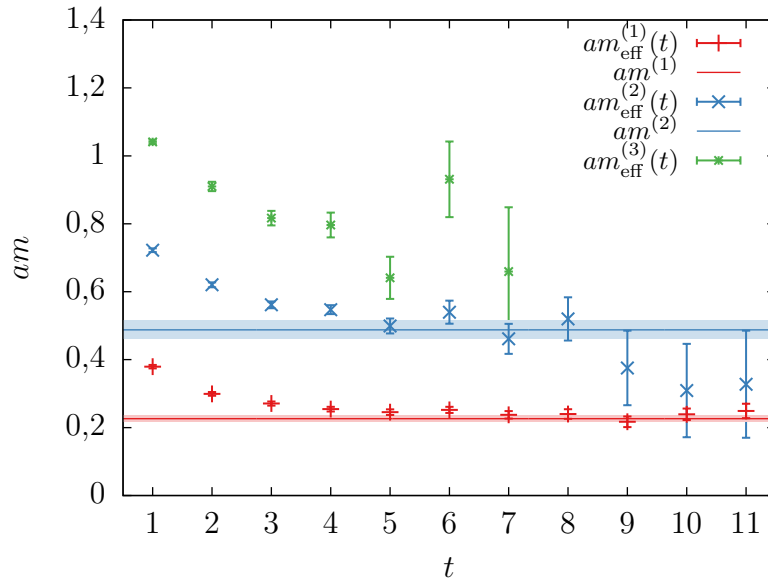


Abbildung 5.13.: Effektive und aus Exponentialfits bestimmte Massen für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14435$.

dieselbe Masse für den Grundzustand; die zeitlich antisymmetrische Komponente C_1 zeigte für die effektive Masse längere Plateaus, was kleinere Fehler beim Exponentialfit bedeutete. Daher wurde diese Komponente für die finale Massenbestimmung verwendet [37]. Der Grund dafür, dass die symmetrische Komponente C_{γ_4} ein schlechteres Plateau liefert, ist der langsame Abfall der Anteile angeregter Zustände. Dies lässt die Vermutung zu, dass C_{γ_4} für die Massenbestimmung eben dieser angeregten Zustände mittels Variationsmethode geeignet ist.

Die Verläufe der effektiven Massen für die verschiedenen Werte von κ sind in den Abbildungen 5.11 bis 5.13 gezeigt. Auch hier ist eine zuverlässige Massenbestimmung für alle Werte von κ nur für die beiden größten Eigenwerte möglich. Für alle Werte von κ und für beide Massen m_{eff}^1 und m_{eff}^2 erfolgt für kleine Zeiten ein Abfall zum Plateau. Das Verhalten der Eigenwerte ist für kleine Zeiten also verschieden vom vorher für C_1 beobachteten Verhalten. Gleichzeitig ähnelt der Verlauf der effektiven Massen jedoch dem in [37] für den unverschmierten Korrelator beobachteten. Aufgrund der exponentiell abfallenden Fehler für kleine Zeiten liefert die für C_1 verwendete zweite Variante des fitting robot Massenfits, die über dem Plateau der effektiven Masse liegen. Die erste Variante, welche die Maximierung des Fitintervalls bevorzugt, kann jedoch für alle Werte von κ und alle $m^{(n)}$ für eine konsistente Massenbestimmung verwendet werden. Die so extrahierten Massen sind in Tabelle 5.3 und den Abbildungen 5.14 und 5.15 gezeigt. Sowohl die Massen für die einzelnen Werte von κ als auch die Massen bei κ_c stimmen

Tabelle 5.3.: Extrahierte Massen für C_{γ_4} mit $\beta = 1,9$ auf einem $32^3 \times 64$ -Gitter, gemessen auf N_{confs} Konfigurationen mit der Entfernung s in Monte-Carlo-Zeit.

κ	N_{confs}	s	$am^{(1)}$	$am^{(2)}$	$am^{(3)}$
0,14387	1276	8	0,2768(95)(34)	0,554(13)(22)	0,75(3)(7)
0,14415	1671	12	0,2383(71)(18)	0,472(21)(18)	0,68(4)(1)
0,14435	1343	8	0,2262(90)(34)	0,488(16)(22)	-
κ_c	-	-	0,182(18)	0,415(48)	-

mit Ausnahme des Wertes für $\kappa = 0,14415$ im Rahmen ihrer Fehler mit denen in Tabelle 5.2 überein. Aufgrund der kürzeren Plateaus für den Fit sind die Fehler jedoch größer.

Wie im vorherigen Abschnitt angeführt, ist eine zuverlässige Massenbestimmung für weitere Zustände des Gluino-Glueballes anhand der Eigenwerte $\lambda^{(n)}(t)$ mit $n > 2$ mittels C_1 nicht möglich. Hier ist für alle Werte von κ kein Plateau der effektiven Masse m_{eff}^3 auszumachen. Die Werte schwanken bereits für kleine Zeiten stark und sind mit großen Fehler behaftet. Anders stellt sich dies für C_{γ_4} dar. Auch hier sind die Fehler und Schwankungen der Eigenwerte größer, dennoch ist es möglich, mit Hilfe der Fitroutine Massen zu extrahieren. Die effektiven Massen $m_{\text{eff}}^{(3)}(t)$ und die aus dem Fit gewonnenen Massen mit ihren Fehlern sind ebenfalls in den Abbildungen 5.11 bis 5.13 gezeigt. Auch hier ist das Abfallen des Wertes der effektiven Masse erkennbar, jedoch bilden sich hier keine klaren Plateaus mehr aus. Dennoch ist es anhand des Fits an die Eigenwerte möglich, Massen mit entsprechend großem Fehler zu extrahieren. Lediglich für $\kappa = 0,14435$, also dem Wert, welcher κ_c am nächsten ist, ist es nicht möglich, eine eindeutige Massenbestimmung mit angemessenen Fehlern durchzuführen. Die erste Variante des fitting robot, welche hier auch zur Bestimmung der anderen Massen verwendet wird, gibt den Fit im Intervall $[7;11]$ mit dem Wert $am^{(3)} = 0,54(10)(23)$ aus. Der statistische Fehler beträgt also bereits ca. 20% des Wertes, der systematische Fehler ist noch deutlich größer. Dies spricht dafür, dass die Massenbestimmung hier nicht zuverlässig möglich ist. Die zweite Variante des fitting robot mit der Mindestintervalllänge 3 liefert $am^{(3)} = 0,81(2)(1)$ für den Fit im Intervall $[3;5]$. Wird hingegen eine Länge von 4 gefordert, wird ebenfalls der Fit im Intervall $[7;11]$ ausgewählt. Der Fit ab $t = 3$ scheint, auch im Vergleich mit den anderen Fits für C_{γ_4} zu früh, also vor dem Abfallen zum Plateau, zu starten und daher einen zu großen Wert zu liefern. Eine zuverlässige Bestimmung von $am^{(3)}(\kappa = 0,14435)$ ist also nicht möglich. Daher ist auch eine Extrapolation zum Limes verschwindender Gluinomasse nicht durchführbar.

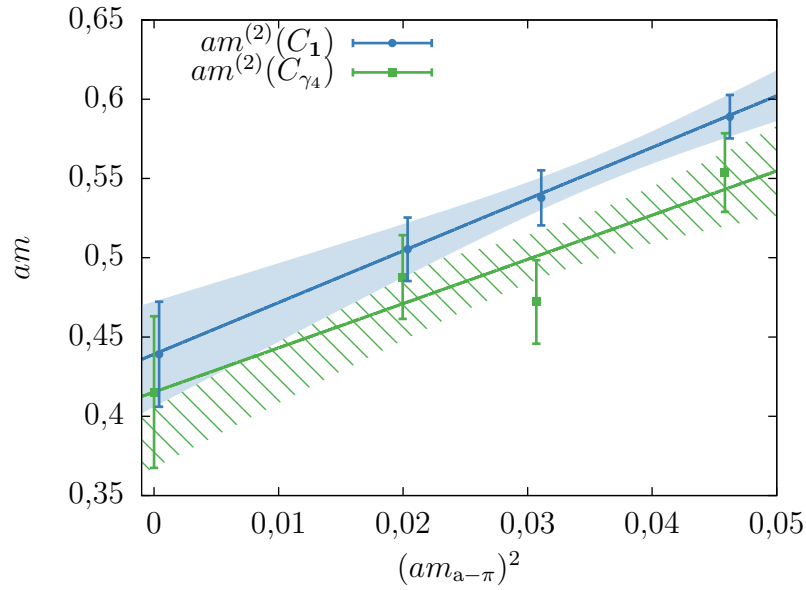


Abbildung 5.14.: Extrapolation von $am^{(2)}$ zum Limes verschwindender Gluinomasse für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ für die Korrelatoren C_1 und C_{γ_4} . Zur besseren Sichtbarkeit sind die Werte für $am^{(2)}(C_1)$ zu größeren Pionmassen verschoben.

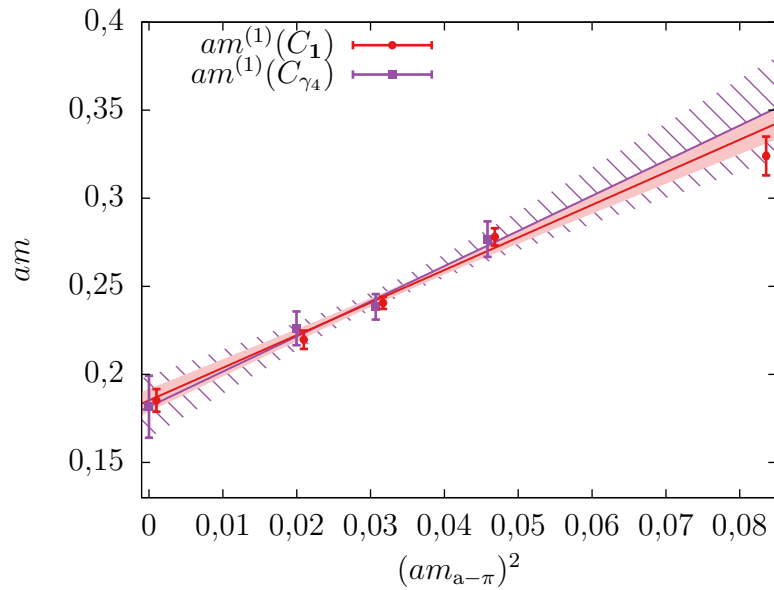


Abbildung 5.15.: Extrapolation von $am^{(1)}$ zum Limes verschwindender Gluinomasse für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ für die Korrelatoren C_1 und C_{γ_4} . Zur besseren Sichtbarkeit sind die Werte für $am^{(2)}(C_1)$ zu größeren Pionmassen verschoben.

Tabelle 5.4.: Extrahierte Massen mit $\beta = 1,9$ auf einem $32^3 \times 64$ -Gitter, gemessen auf N_{confs} Konfigurationen mit der Entfernung s in Monte-Carlo-Zeit. Wird die Extrapolation ohne $\kappa = 0,1433$ durchgeführt, ergibt sich $a\bar{m}^{(1)}(\kappa_c) = 0,174(10)$.

κ	N_{confs}	s	$a\bar{m}^{(1)}$	$a\bar{m}^{(2)}$
0,14387	1276	8	0,2778(45)(32)	0,581(11)(11)
0,14415	1671	12	0,2401(37)(5)	0,518(9)(16)
0,14435	1343	8	0,2212(56)(12)	0,499(14)(15)
κ_c	-	-	0,187(7)	0,425(34)

5.5. Finale Massenbestimmung

Die oben auf Grundlage der beiden verschiedenen Korrelatoren bestimmten Massen stimmen mit Ausnahme von $m^{(2)}(\kappa = 0,14415)$ im Rahmen ihres Fehlers überein. Dies gilt auch für die Werte, welche durch die Extrapolation zum Limes verschwindender Gluinomassen bestimmt wurden. Da beide Korrelatoren dieselben Zustände beschreiben, können die vorhandenen Abweichungen auf systematische Fehler hindeuten. Um eine endgültige Abschätzung für die Masse des Gluino-Glueballes bei $\beta = 1,9$ treffen zu können, müssen die Ergebnisse für C_1 und C_{γ_4} sinnvoll verknüpft werden. Damit dabei die verschiedenen großen Fehler der Fits berücksichtigt werden, wird für jeden Wert von κ das gewichtete arithmetische Mittel beider Massen $\bar{m}^{(n)}$ gebildet, wobei statistische und systematische Fehler berücksichtigt werden. Anschließend erfolgt eine Extrapolation zum Limes verschwindender Gluinomassen anhand der ermittelten Werte $\bar{m}^{(n)}(\kappa)$.

Da die Messungen für beide Korrelatoren auf denselben Konfigurationen stattgefunden haben, ist anzunehmen, dass die Ergebnisse korreliert sind. Eine einfache Verknüpfung der Mittelwerte und ihrer Fehler birgt also die Gefahr, diese Fehler zu unterschätzen. Anstelle einer einfachen Fehlerfortpflanzung wird für den statistischen Fehler des gewichteten Mittels die Jackknife-Methode verwendet. Hier wird $\bar{m}^{(n)}$ auf den einzelnen Jackknife-Bins berechnet, was die Bestimmung des statistischen Fehlers nach (4.75) ermöglicht.

Auch für den systematischen Fehler des Mittels kann keine einfache Fehlerfortpflanzung verwendet werden. Der schlechteste Fall liegt vor, wenn die Fitintervalle beider Korrelatoren so gewählt werden, dass die Masse grundsätzlich zu groß oder grundsätzlich zu klein bestimmt wird. In diesem Fall addieren sich die systematischen Fehler beider Massen (gewichtet) auf. Für konservative Abschätzung des systematischen Fehlers wird dieser schlechteste Fall angenommen.

Die mit dieser Methode ermittelten gewichteten Mittelwerte und der zu $\kappa = \kappa_c$ extrapolierte Wert sind in Tabelle 5.4 sowie in den Abbildungen 5.16 und 5.17 gezeigt.

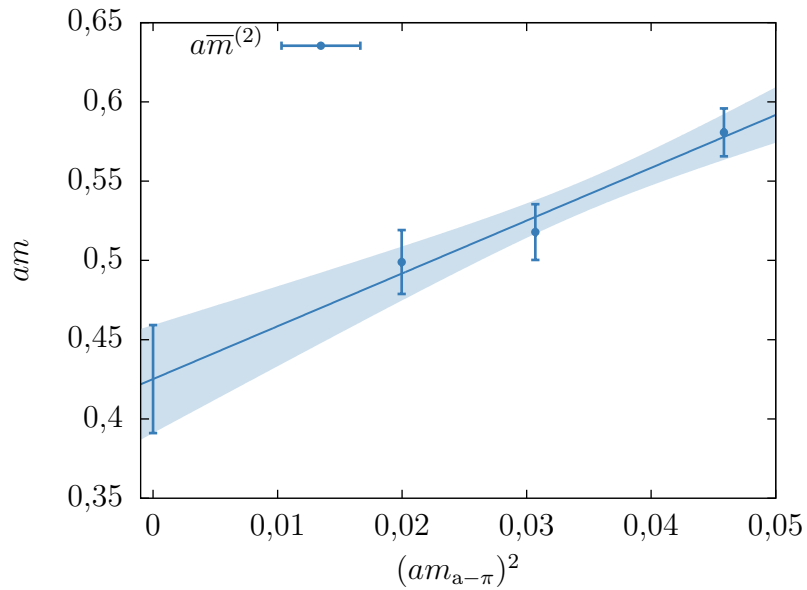


Abbildung 5.16.: Extrapolation von $a\bar{m}^{(2)}$ zum Limes verschwindender Gluino-masse für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ für das gewichtete Mittel.

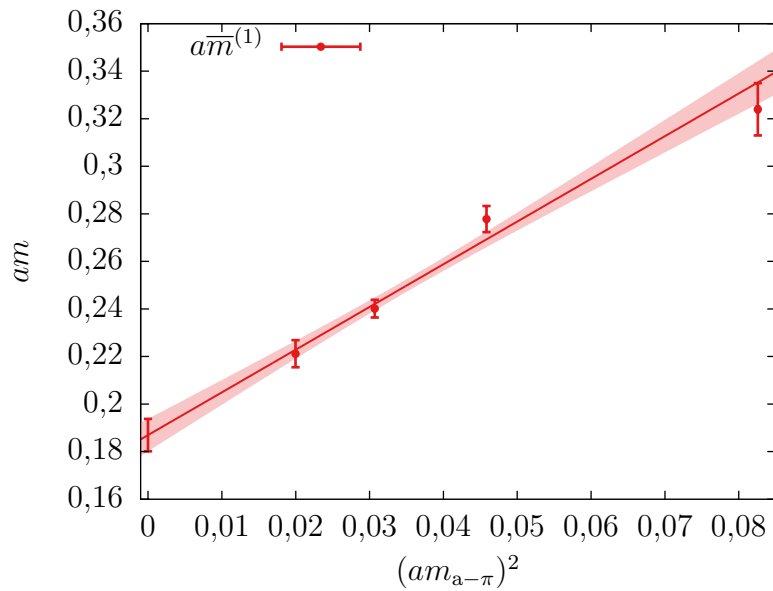


Abbildung 5.17.: Extrapolation von $a\bar{m}^{(1)}$ zum Limes verschwindender Gluino-masse für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ für das gewichtete Mittel.

5.6. Verschiedene Versionen der Variationsmethode

In Abschnitt 4.5 sind drei verschiedene Methoden zur Anwendung der Variationsmethode vorgestellt. Für obige Auswertung wurde durchgängig die *t-Eigenvektor-Methode* mit $t_0 = 0$ verwendet. Diese Methode ist für alle Werte von κ stabil, die Aufteilung der Korrelationsmatrix $C(0)$ mit der Cholesky-Zerlegung, wie in (4.54) gezeigt, ist bei einem passenden Satz von Operatoren stabil und kann daher konsistent angewendet werden. Nach Blossier et al. [47] können die Fehler der Eigenwerte verringert werden, wenn beim Lösen des Eigenwertproblems (4.41) $t_0 > t/2$ gewählt wird. Dies ist für die vorliegenden Daten des Gluino-Glueballes nicht möglich. Bereits ab $t_0 = 3$ kann es dazu kommen, dass $C(t_0)$ nicht mehr positiv definit und eine Lösung des Eigenwertproblems nicht mehr möglich ist. Für die Bestimmung von $m^{(1)}$, bei der Fits mit $t_{\max} = 27$ durchgeführt werden können, ist eine Erhöhung von t_0 nicht zielführend, da die Bedingung $t_0 > t/2$ nicht eingehalten werden kann. Des Weiteren kann es auch bei $t_0 = 2$ aufgrund von numerischen Schwankungen bei der Lösung des Eigenwertproblems zur Vergrößerung der Fehler kommen. Für $m^{(2)}$ sind die Plateaus sehr kurz. Eine Erhöhung von t_0 kann hier dazu führen, dass die Daten für kleine Zeiten $t = 2$ oder $t = 3$ nicht mehr verwendet werden können, was das Plateau unnötig verkürzt. Eine Verbesserung der Statistik und eine damit einhergehende kleinere Schwankung der kleinsten Eigenwerte könnte dazu beitragen, die t-Eigenvektor-Methode auch mit größeren Startzeiten t_0 zu nutzen.

Die Problematik der Zerlegung der Matrix $C(t)$ mit $t \geq 3$ hat unmittelbar Konsequenzen auf die Anwendbarkeit der *Projektionsmethode*. Hier muss $C(t)$ für jeden betrachteten Zeitpunkt t zerlegt werden, was dazu führt, dass lediglich Daten für kleine Zeiten t gewonnen werden können, bevor die Zerlegung scheitert. Diese Daten reichen nicht aus, um aus ihnen weitere Schlüsse zu ziehen.

Die *fixed-vector Methode* ist besonders dazu geeignet, die Massenbestimmung bei beinahe entarteten Eigenwerten zu verbessern. Sind die Eigenwerte weit genug voneinander separiert, wird keine Verbesserung erwartet, da die Orthogonalität der Eigenvektoren lediglich für einen Zeitpunkt gewährleistet ist und für alle größeren Zeiten Störungen des Grundzustandes zu erwarten sind. Die Verwendung der fixed-vector Methode bringt für die vorliegenden Daten keine Verbesserung der Fehler oder Verlängerung der nutzbaren Fitintervalle. Da mit dem Korrelator C_{γ_4} eine Abschätzung für die Masse $m^{(3)}$ getroffen werden kann und die Eigenwerte klar genug voneinander separiert zu sein scheinen, ist eine solche Verbesserung jedoch auch nicht zu erwarten. Die Eigenwerte von C_{γ_4} für $\kappa = 0,14387$ sind in Abbildung 5.18 gezeigt. Hier ist klar erkennbar, dass die Eigenwerte nicht entartet sind.

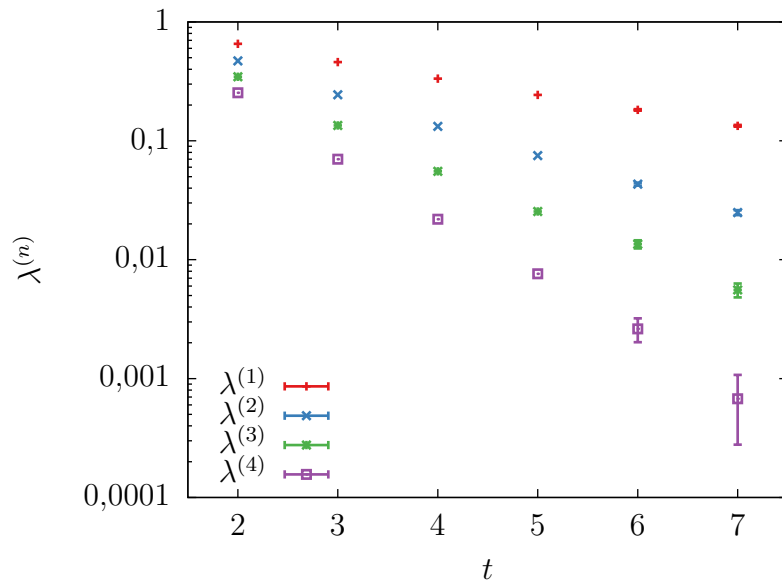


Abbildung 5.18.: Eigenwerte $\lambda^{(n)}(t)$ für ein $32^3 \times 64$ -Gitter mit $\beta = 1,9$ und $\kappa = 0,14387$ für den Korrelator C_{γ_4} . Wenn die Symbole größer als die Fehlerbalken sind, sind diese nicht dargestellt.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Die von der DESY-Münster-Kollaboration durchgeführten Untersuchungen der Multipllettstruktur der niederenergetischen gebundenen Zustände der $\mathcal{N} = 1$ supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie mit der Eichgruppe $SU(2)$ umfassen unter anderem die Massenbestimmung dieser Zustände anhand von rein gluonischen, mesonischen und fermionischen Operatoren. Durch die Analyse für verschiedene Gittergrößen, Kopplungen und Gitterkonstanten ist eine Extrapolation zum Kontinuum möglich, welche darauf schließen lässt, dass die Supersymmetrie, welche auf dem Gitter gebrochen ist, im Kontinuumslimit wieder hergestellt ist. Dieser Schluss wird aus der Tatsache gezogen, dass die Massen der im leichtesten Supermultiplett erwarteten Teilchen hier im Rahmen von zwei Standardabweichungen übereinstimmen. Eine Aussage über das schwerere Multipllett konnte bisher nicht getroffen werden. Dies liegt vor allem darin begründet, dass eine mögliche Mischung zwischen den gluonischen und mesonischen Zuständen erwartet wird, das Mischungsverhältnis jedoch noch nicht bekannt ist. Eine Möglichkeit Aussagen über das schwere Multipllett zu treffen ist durch die Betrachtung des ersten angeregten Zustandes des Gluino-Glueballes gegeben, weshalb dieser Zustand im Zentrum dieser Arbeit stand.

Um die zur Massenbestimmung des ersten angeregten Zustandes verwendete Variationsmethode so zu optimieren, dass aussagekräftige Resultate erzielt werden können, wurde zunächst der Einfluss von Smearing auf den verwendeten Operator des Gluino-Glueballes (3.49) untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass stark verschmierte Operatoren nicht nur bei der Massenbestimmung des Grundzustandes anhand eines Korrelators, sondern auch bei der Variationsmethode das Signal verbessern. Die Analyse verschieden aufgebauter Korrelationsmatrizen anhand des Signals bei der Massenbestimmung und der Eigenvektoren des verallgemeinerten Eigenwertproblems zeigt, dass für den ersten angeregten Zustand die Verwendung von stark verschmierten Operatoren von Vorteil ist, hier jedoch im Gegensatz zum Grundzustand innerhalb des untersuchten Bereichs der APE-Smearinglevel ein Optimum erreicht wird. Diese Untersuchungen ermöglichten die Auswahl einer Menge von Operatoren, welche einerseits die Qualität der Massenbestimmung optimiert und andererseits klein genug gehalten ist, um die zur Messung benötigte Rechenzeit nicht unnötig zu verlängern. Diese für $\kappa = 0,14415$ ausgewählten Operatoren wurden anschließend für alle weiteren Werte von κ verwendet.

Bei den zur Massenbestimmung verwendeten Exponentialfits besteht eine Gefahr der Beeinflussung des Messergebnisses durch den Experimentator, beispielsweise durch die

manuelle Auswahl eines geeigneten Fitintervalls. Die Anwendung des hier verwendeten fitting robot kann diese Beeinflussung verringern, da hier das Intervall automatisch gewählt wird. Dennoch bleibt ein mittels fitting robot gewonnenes Ergebnis weiterhin nicht unbeeinflusst. So werden in dieser Arbeit zwei verschiedene Interpretationen der drei Axiome präsentiert, die jeweils besser zu einem der hier betrachteten Korrelatoren zu passen scheinen. Es musste also weiterhin eine Auswahl getroffen werden. Dennoch war es möglich, jeweils eine der beiden Varianten konsistent für einen Korrelator zu verwenden. Trotz der Automatisierung der Massenbestimmung müssen die erhaltenen Ergebnisse beispielsweise anhand der effektiven Masse weiterhin auf ihre Plausibilität überprüft werden. Hier sollte jedoch keine Beeinflussung des Ergebnisses sondern lediglich eine Beurteilung geschehen, ob im vorliegenden Fall eine im Rahmen der Fehler zuverlässige Massenbestimmung möglich ist. Ein weiterer Aspekt des fitting robot ist die Automatisierbarkeit der Massenbestimmung. Bereits bei den hier bestimmten 15 verschiedenen Massen bedeutet dies eine Arbeitserleichterung. Im Falle der Verwendung der fixed-vector Methode ermöglicht diese Automatisierung der Auswertung die Untersuchung der Massenbestimmung für verschiedenste Werte von t_0 und t_1 [61].

Bei jeder Massenbestimmung ist die richtige Abschätzung der statistischen und systematischen Fehler von entscheidender Bedeutung für die Verwendbarkeit des Ergebnisses. Die Untersuchung der Autokorrelationszeiten der extrahierten sekundären Observablen und der daraus resultierenden richtigen Abschätzung für den statistischen Fehler wurde hier anhand von Jackknife-Binning getätigt. Diese Methodik wurde bereits in [23] und [24] bei der Massenbestimmung der Gluebälle verwendet und scheint auch im Falle der Gluino-Gluebälle zuverlässig zu funktionieren. Obwohl Jackknife-Binning eine stabile Methode zur Bestimmung der statistischer Fehler und der Autokorrelationszeiten sekundärer Observablen darstellt, liefert die Γ -Methode eine zuverlässigere und genauere Bestimmung dieser Größen [53]. Die Anwendung auf die Variationsmethode kann jedoch zu numerischen Instabilitäten führen. Da bereits das Jackknife-Binning zu ausreichenden Fehlerabschätzungen führt, wurde eine verbesserte Anwendung der Γ -Methode auf die Variationsmethode nicht weiter untersucht, durch diese könnte in der Zukunft eine Verbesserung des Analyseablaufs erfolgen.

Obwohl bei der Bestimmung von $m^{(2)}$ Resultate erzielt werden konnten, sind die Fehler hier deutlich größer, als für die Masse des Grundzustandes. Um mit der vorhandenen Messzeit die vorliegenden Konfigurationen stets optimal nutzen zu können, wurde die Schrittweite s in Monte-Carlo-Zeit bei der Erhöhung der Statistik halbiert. So konnte beobachtet werden, dass die Verbesserung des statistischen Fehlers bei Halbierung der Schrittweite und einer damit einhergehenden Verdopplung der Messungen beinahe mit dem Faktor $1/\sqrt{2}$ erfolgt ist. Dies lässt darauf schließen, dass eine weitere Erhöhung der Statistik die Fehler weiter verringern könnte. Eine obere Grenze für diese Verbesserung ist jedoch durch die Anzahl der unabhängigen Konfigurationen gegeben. Wenn die in

Tabelle 5.1 angegebenen konservativ abgeschätzten integrierten Autokorrelationszeiten als Grundlage für die Bestimmung der Anzahl der vorhandenen effektiv unabhängigen Konfigurationen gewählt werden, ist nicht eindeutig, ob eine Verbesserung des Fehlers des Grundzustandes erwartet werden kann. Für eine Schrittweite $s = 16$ kann mittels Jackknife-Binning für $am^{(1)}(C_1)$ die integrierte Autokorrelationszeit $\tau_{\text{int}} = 1,2(4)$ abgeschätzt werden. Der Vergleich mit dem Wert aus Tabelle 5.1 zeigt, dass eine Halbierung der Schrittweite nicht mit einer Verdoppelung von τ_{int} einhergeht. Auch für den ersten angeregten Zustand ist keine Verbesserung mit dem Faktor $1/\sqrt{2}$ zu erwarten. Da jedoch die Fehler der integrierten Autokorrelationszeiten nicht zu vernachlässigen sind, ist eine Aussage über die Anzahl der unabhängigen Konfigurationen nicht zuverlässig.

Trotz der im Vergleich zu $m^{(1)}$ größeren Fehler ist es gelungen, zuverlässige Massenbestimmungen für $m^{(2)}$ mit $\beta = 1,9$ und drei Werte von κ vorzunehmen. Durch die Betrachtung der beiden Anteile C_1 und C_{γ_4} des Korrelators des Gluino-Glueballes können dabei grobe systematische Fehler in der Auswertung ausgeschlossen werden. Anhand der Massen für drei Werte von κ konnte des Weiteren eine Extrapolation zum Limes verschwindender Gluinomassen vorgenommen werden. Um endgültige Aussagen über die Masse des ersten angeregten Zustandes des Gluino-Glueballes im Kontinuumslikes mit wieder hergestellter Supersymmetrie tätigen zu können, sind jedoch Massenbestimmungen für andere Werte von β notwendig. Diese liegen zur Zeit aufgrund des wegen der Inversion der Fermionmatrix hohen Rechenaufwandes bei der Messung der Korrelationsmatrix nicht vor. Zu Beginn der Untersuchungen des Gluino-Glueballes wurden erste Messungen für $\beta = 1,75$ und $\kappa = 0,14925$ vorgenommen. Hier konnte jedoch keine zuverlässige Massenbestimmung für $m^{(2)}$ erfolgen. Zum damaligen Zeitpunkt war nicht klar, ob dies in dem gewählten Wert von β mit der zur Verfügung stehenden Statistik begründet war, weshalb für die weiteren Messungen $\beta = 1,9$ gewählt wurde. Rückblickend ist es jedoch möglich, dass für $\beta = 1,75$ zur Konstruktion der Korrelationsmatrix Operatoren mit einem zu kleinen N_{APE} gewählt wurden und eine Massenbestimmung mit ähnlichen Parametern wie bei $\beta = 1,9$ möglich ist.

Obwohl keine Aussage über den Fall einer wieder hergestellten Supersymmetrie getätigt werden kann, kann vermutet werden, dass der untersuchte Zustand Teil des schwereren Supermultipletts nach Farrar et al. [10] ist. In diesem Fall wird ein weiterer skalärer und pseudoskalärer Zustand mit einer im supersymmetrischen Limes gleichen Masse erwartet. Aufgrund der zu erwartenden Mischung der gluonischen und mesonischen Zustände ist nicht klar, ob die verwendeten Operatoren auf denselben niedrigen Zustand oder verschiedene gebundene Zustände projizieren. Für den Grundzustand des 0^{-+} -Glueballes und den ersten angeregten Zustand des 0^{++} -Glueballes gibt es Hinweise, dass auch diese Zustände Teil eines schwereren Supermultipletts sein könnten [26].

Neben der Untersuchung des ersten angeregten Zustandes, wurde auch die Masse $m^{(1)}$ des Grundzustands des Gluino-Glueballes neu bestimmt. Hier ergeben sich im Vergleich

zu den auf der Grundlage eines Fits an die Korrelationsfunktion gewonnenen Massen leicht veränderte Werte, gleichzeitig können die Fehler klar reduziert werden. Bei der Extrapolation zum Limes $m_g = 0$ macht es einen Unterschied, ob der Wert bei $\kappa = 0,1433$ mit in den Fit einbezogen wird. Dieser wurde nicht mittels Variationsmethode bestimmt, dennoch sollte auch die aus dem Fit an die Korrelationsfunktion extrahierte Masse ein richtiges Ergebnis liefern. Die Untersuchung von $\kappa = 0,1433$ mit der Variationsmethode und eine damit einhergehende Verbesserung des Ergebnisses der Extrapolationen von $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$ ist geplant, jedoch wegen des Rechenaufwandes noch nicht abgeschlossen.

Die Untersuchung der durch die Betrachtung von C_{γ_4} bestimmten Eigenwerte zeigt, dass auch für $n \geq 2$ Abschätzungen für Massen getroffen werden können. Eine Einordnung dieser höheren Zustände in mögliche weitere Multiplettstrukturen oder Streuzustände kann jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht getätigt werden. Dennoch kann anhand der Eigenwerte in Abbildung 5.18 geschlossen werden, dass diese weit genug separiert sind, um zuverlässig mit der t-Eigenvektor-Methode und nicht mit der fixed-vector Methode bestimmt zu werden. Die Nutzung anderer Methoden als der t-Eigenvektor-Methode oder die Verwendung größerer Startzeiten t_0 hat sich als nicht durchführbar oder nicht gewinnbringend erwiesen. Neben den hier vorgestellten Versionen die Variationsmethode zu nutzen, könnten in Zukunft auch andere Verfahren zur Massenbestimmung angeregter Zustände verwendet werden. Die AMIAS-Methode [63, 64] ermöglicht die Einbeziehung der bereits gemessenen Korrelationsmatrizen, nutzt zur Massenbestimmung jedoch ein grundlegend anderes Verfahren.

Aufbauend auf den Erfahrungen, welche in dieser Arbeit gemacht wurden, können Untersuchungen in verschiedenen Richtungen erfolgen. Zum einen ist es möglich, die für $\beta = 1,9$ verwendeten Smearingparameter auch für andere Werte von β zu testen und somit Massenbestimmungen für verschiedene Kopplungen vorzunehmen, welche eine Extrapolation zum Kontinuumslikes ermöglichen. Zum anderen scheint auch für die Gluebälle und Gluinobälle eine Untersuchung höherer Zustände ratsam, um Schlüsse über eine mögliche Multiplettstruktur ziehen zu können. Des Weiteren ist nicht klar, ob die hier beobachteten angeregten Zustände wirklich zu Ein-Teilchen-Zuständen des Gluino-Glueballes gehören, oder ob hier gebundene Zustände, beispielsweise aus einem 0^{++} -Glueball und einem Gluino-Glueball, auftreten. Diese Möglichkeiten können durch eine reine Betrachtung der Massen nicht unterschieden werden. Eine Untersuchung der Streuzustände mittels Zwei-Teilchen-Operatoren könnte in Zukunft mehr Klarheit bringen. Auch die genauere Untersuchung der Eigenwerte $\lambda^{(n)}$ der Gluino-Gluebälle für $n > 2$ kann dazu genutzt werden, Aussagen über mögliche Streuzustände zu tätigen. Im Falle des Auftretens von Streuzuständen wird auf einem endlichen Gitter ein dichtes Spektrum diskreter Zustände mit variierendem Relativimpuls oberhalb des niedrigsten Zwei-Teilchen-Zustandes erwartet. Zusätzlich zur Untersuchung der Eichgruppe $SU(2)$, kann ein analoges Vorgehen für $SU(3)$ erfolgen [65].

A. Notation

Im Folgenden werden die Konventionen aufgelistet, welche in dieser Arbeit verwendet werden. In der gesamten Arbeit werden natürliche Einheiten betrachtet, es gilt also $\hbar = 1$ und $c = 1$.

Die Anzahl der Farben in der betrachteten SU(2)-SYM-Theorie ist $N = 2$. Die entsprechenden Farbindizes der adjungierten Darstellung werden mit lateinischen Buchstaben $a, b, \dots \in \{1, \dots, N^2 - 1\}$ gekennzeichnet. Die Farbindizes der fundamentalen Darstellung werden nicht explizit ausgeschrieben. Die Anzahl der Flavors ist $\mathcal{N} = 1$. Spin-Indizes werden mit griechischen Buchstaben von Beginn des Alphabets $\alpha, \beta, \dots \in \{1, \dots, 4\}$ gekennzeichnet. Die Raumzeitkomponenten werden mit griechischen Buchstaben aus der Mitte des Alphabets, also μ, ν, \dots gekennzeichnet. In der Minkowski-Metrik nehmen diese die Werte $0, \dots, 3$ ein. Im überwiegenden Teil der Arbeit wird jedoch in der euklidischen Metrik gearbeitet, hier gilt $\mu, \nu, \dots \in \{1, \dots, 4\}$. Wenn lediglich die räumlichen Komponenten betrachtet werden, werden diese durch lateinische Buchstaben aus der Mitte des Alphabets gekennzeichnet, $i, j, k, \dots \in \{1, 2, 3\}$. Wenn nicht anders gekennzeichnet, wird die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, Summierungen über doppelt auftretende Indizes sind impliziert.

A.1. Pauli-Matrizen

Die Generatoren der SU(2) sind durch

$$T_a = \frac{1}{2}\sigma_a, \quad a = 1, 2, 3 \quad (\text{A.1})$$

gegeben. Dabei sind σ_a die Paulimatrizen gegeben durch

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

A.2. Dirac-Matrizen

Beim Wechsel vom Minkowski-Raum in den euklidischen Raum muss beachtet werden, dass hier die Dirac-Matrizen anders definiert sind. Die Beziehung zwischen den Matrizen ist

$$\gamma_{1,2,3}^{\text{euklid.}} = -i\gamma_{1,2,3}^{\text{Mink.}}, \quad \gamma_4^{\text{euklid.}} = \gamma_0^{\text{Mink.}}. \quad (\text{A.1})$$

Die euklidischen Dirac-Matrizen werden mit γ_μ ($\mu = 1,2,3,4$) bezeichnet. Sie sind hermitesch und erfüllen

$$\gamma_\mu = \gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu^{-1}, \quad \{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (\text{A.2})$$

Mit den Paulimatrizen können die Dirac-Matrizen explizit ausgeschrieben werden, es gilt

$$\gamma_{1,2,3} = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_{1,2,3} \\ i\sigma_{1,2,3} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

In der chiralen Darstellung werden γ_4 und $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$ durch

$$\gamma_4 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1}_2 \\ \mathbf{1}_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

dargestellt.

B. Nichtabelsche Eichtheorien

Die Notwendigkeit der Einführung von Eichfeldern wird bei der Forderung nach lokaler Eichinvarianz deutlich. Ein aus Feldern mit N komplexen Komponenten

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \vdots \\ \phi_N(x) \end{pmatrix}, \quad \phi^\dagger = (\phi_1^*(x), \dots, \phi_N^*(x)) \quad (\text{B.1})$$

gebildetes Skalarprodukt

$$\phi^\dagger(x) \cdot \phi(x) = \sum_{i=1}^N \phi_i^* \phi_i \quad (\text{B.2})$$

ist invariant unter globalen Transformationen

$$\phi \longrightarrow \phi' = \Omega \phi \quad (\text{B.3})$$

mit $\Omega \in \text{SU}(N)$. Da die Transformation global ist, vertauschen Ableitungen mit Ω , sodass alle Terme der Lagrangedichte eines freien Feldes

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^\dagger(x) \cdot \partial^\mu \phi(x) - m^2 \phi^\dagger(x) \cdot \phi(x) \quad (\text{B.4})$$

invariant sind. Bei lokalen Transformationen mit

$$\Omega = \Omega(x) = \exp \left(-i \sum_{a=1}^{N^2-1} \alpha^a(x) T_a \right) \in \text{SU}(N) \quad (\text{B.5})$$

ist diese Invarianz nicht mehr gegeben. Dabei sind T_a die $N^2 - 1$ Generatoren der $\text{SU}(N)$. Bei der $\text{SU}(2)$ sind dies die drei Paulimatrizen $\frac{1}{2}\sigma_a$ für $a = 1, 2, 3$. Bei der Ableitung des transformierten Feldes treten nun inhomogene Terme auf,

$$\partial_\mu \phi'(x) = \Omega(x) \partial_\mu \phi(x) + (\partial_\mu \Omega(x)) \phi(x). \quad (\text{B.6})$$

Die Invarianz lässt sich durch die Einführung der kovarianten Ableitung D_μ mit

$$D_\mu \phi(x) = \partial_\mu \phi(x) - ig \sum_{a=1}^{N^2-1} A_\mu^a(x) T_a \phi(x) \quad (\text{B.7})$$

$$= \partial_\mu \phi(x) - ig A_\mu(x) \phi(x), \quad \text{mit } A_\mu(x) = A_\mu^a(x) T_a \quad (\text{B.8})$$

wieder herstellen, wobei die $N^2 - 1$ vielen Eichfelder A_μ^a und die Kopplungskonstante g verwendet wurden. Aus der Forderung, dass

$$D'_\mu \phi'(x) = \Omega(x) D_\mu \phi(x) \quad (\text{B.9})$$

gelten muss, damit die Lagrangedichte invariant unter lokalen Eichtransformationen ist, lässt sich herleiten, dass die Eichfelder gemäß

$$A'_\mu = \Omega(x) A_\mu(x) \Omega^{-1}(x) + \frac{i}{g} \Omega(x) \partial_\mu \Omega^{-1}(x) \quad (\text{B.10})$$

transformieren. Die Lagrangedichte der Eichfelder lässt sich über den Feldstärketensor $F_{\mu\nu}$ bestimmen. Dieser wird mit Hilfe der kovarianten Ableitung mittels

$$F_{\mu\nu} = \frac{i}{g} [D_\mu, D_\nu] = (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) - ig [A_\mu, A_\nu] \quad (\text{B.11})$$

$$= \partial_\mu A_\nu^a T_a - \partial_\nu A_\mu^a T_a + g A_\mu^a A_\nu^b f_{ab}^c T_c =: F_{\mu\nu}^a T_a \quad (\text{B.12})$$

berechnet und transformiert gemäß

$$F'_{\mu\nu}(x) = \Omega(x) F_{\mu\nu}(x) \Omega^{-1}(x). \quad (\text{B.13})$$

Die eichinvariante Lagrangedichte der sogenannten Yang-Mills-Wirkung lautet dann

$$\mathcal{L}_{\text{YM}} = -\frac{1}{2} \text{Tr}[F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{a,\mu\nu}. \quad (\text{B.14})$$

C. Graßmann-Algebra

Für die Beschreibung von Fermionen ist die Nutzung von antikommutierenden Graßmannzahlen vonnöten. Es wird ein Satz von Graßmannzahlen $\eta_i, i = 1, \dots, N$ betrachtet, welche

$$\eta_i \eta_j = -\eta_j \eta_i \quad \forall i, j \quad (\text{C.1})$$

erfüllen. Durch diese Eigenschaft sind diese Variablen nilpotent, es gilt also $\eta_i^2 = 0$. Daher bricht die Reihenentwicklung einer Funktion nach einer endlichen Anzahl an Termen ab

$$F(\eta_1, \dots, \eta_N) = a + \sum_i a_i \eta_i + \sum_{i < j} a_{ij} \eta_i \eta_j + \sum_{i < j < k} a_{ijk} \eta_i \eta_j \eta_k + \dots + a_{12\dots N} \eta_1 \eta_2 \dots \eta_N \quad (\text{C.2})$$

mit den komplexen Koeffizienten $a, a_i, \dots, a_{12\dots N}$. Die Ableitung nach einer Graßmannzahl ist durch

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_k = \delta_{ik} \quad (\text{C.3})$$

definiert und erfüllt die Eigenschaften

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} 1 = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \eta_i} \frac{\partial}{\partial \eta_j} = -\frac{\partial}{\partial \eta_j} \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \quad \frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j = -\eta_j \frac{\partial}{\partial \eta_i}. \quad (\text{C.4})$$

Das Integral über Graßmannzahlen ist aufgrund der Struktur der Graßmannzahlen ähnlich zur Ableitung. Es gilt:

$$\int d\eta_i F = \frac{\partial}{\partial \eta_i} F \quad (\text{C.5})$$

$$\int d\eta_i d\eta_j F = -\int d\eta_j d\eta_i F \quad (\text{C.6})$$

$$\int d\eta_N \dots d\eta_1 F = a_{12\dots N} \in \mathbb{C} \quad (\text{C.7})$$

Für die Beschreibung von Fermionen auf dem Gitter wird das Gaußintegral für Graßmannzahlen benötigt. Dazu wird eine Graßmannalgebra mit $N = 2M$ Generatoren

$$\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_M, \bar{\eta}_1, \bar{\eta}_2, \dots, \bar{\eta}_M$$

eingeführt. Das Skalarprodukt wird über

$$(\bar{\eta}A, \eta) = \sum_{i,j=1}^M \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j \quad (\text{C.8})$$

definiert. Für die Funktion

$$F(\eta_1, \dots, \bar{\eta}_M) = e^{(\bar{\eta}A, \eta)} = \sum_{m=1}^M \frac{1}{m!} (\bar{\eta}A, \eta)^m = 1 + (\bar{\eta}A, \eta) + \frac{1}{2} (\bar{\eta}A, \eta)(\bar{\eta}A, \eta) + \dots \quad (\text{C.9})$$

gilt nun

$$\frac{1}{M!} (\bar{\eta}A, \eta)^M = \sum_{j_1, \dots, j_M} \epsilon_{j_1, \dots, j_M} A_{1j_1} \dots A_{Mj_M} \bar{\eta}_1 \eta_1 \dots \bar{\eta}_M \eta_M \quad (\text{C.10})$$

$$= (\det A) \bar{\eta}_1 \eta_1 \dots \bar{\eta}_M \eta_M, \quad (\text{C.11})$$

wobei $\epsilon_{j_1 j_2 \dots j_M}$ das Levi-Civita-Symbol ist. Damit gilt für das Integral über $F(\eta_1, \dots, \bar{\eta}_M)$

$$\int d\eta_1 d\bar{\eta}_1 \dots d\eta_M d\bar{\eta}_M e^{(\bar{\eta}A, \eta)} = \det A. \quad (\text{C.12})$$

Nach der Einführung von Quelltermen $\theta_i, \bar{\theta}_i$ lassen sich die folgenden Integrale berechnen:

$$\int d\eta_1 \dots d\eta_M d\bar{\eta}_1 \dots d\bar{\eta}_M e^{(\bar{\eta}A, \eta) + (\bar{\eta}, \theta) + (\bar{\theta}, \eta)} = (\det A) e^{-\bar{\theta}(A^{-1}\theta)} \quad (\text{C.13})$$

$$\begin{aligned} \int d\eta_1 \dots d\bar{\eta}_M \eta_i \bar{\eta}_j e^{(\bar{\eta}A, \eta)} &= -\frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_i} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \int d\eta_1 \dots d\bar{\eta}_M e^{(\bar{\eta}A, \eta) + (\bar{\eta}, \theta) + (\bar{\theta}, \eta)} \Big|_{\theta = \bar{\theta} = 0} \\ &= (\det A) (-A_{ij}^{-1}) \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Die Verallgemeinerung zu einer funktionalen Graßmannalgebra liefert für $\eta(x), \bar{\eta}(x)$:

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{D}\eta \mathcal{D}\bar{\eta} \exp \left\{ \int d^4x [\bar{\eta}(x)(A\eta)(x) + \bar{\eta}(x)\theta(x) + \bar{\theta}(x)\eta(x)] \right\} \\ &= (\det A) \exp \left\{ - \int d^4x \bar{\theta}(x)(A^{-1}\theta)(x) \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Literaturverzeichnis

- [1] P. Langacker und S. Gasiorowicz, „Elementary Particles in Physics“, in „Encyclopedia of Physics, Third Edition“, R. C. Lerner und G. L. Trigg, Hrsg., S. 671. Wiley-VCH, 2005.
- [2] **Particle Data Group** Collaboration, C. Patrignani *et al.*, „Review of Particle Physics“, *Chin. Phys. C* **40** (2016) 100001.
- [3] I. J. R. Aitchison, „Supersymmetry and the MSSM: An Elementary Introduction“, [arXiv:hep-ph/0505105](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0505105).
- [4] G. Bertone, D. Hooper und J. Silk, „Particle dark matter: Evidence, candidates and constraints“, *Phys. Rept.* **405** (2005) 279–390, [arXiv:hep-ph/0404175](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0404175).
- [5] S. P. Martin, „A Supersymmetry Primer“, in „Perspectives on Supersymmetry“, S. 1–98. World Scientific, 1997. [arXiv:hep-ph/9709356](https://arxiv.org/abs/hep-ph/9709356).
- [6] P. Bechtle, T. Plehn und C. Sander, „Supersymmetry“, in „The Large Hadron Collider: Harvest of Run 1“, T. Schörner-Sadenius, Hrsg., S. 421–462. Springer International Publishing, 2015. [arXiv:1506.03091](https://arxiv.org/abs/1506.03091).
- [7] G. Bergner und S. Catterall, „Supersymmetry on the lattice“, *Int. J. Mod. Phys. A* **31** (2016) 1643005, [arXiv:1603.04478](https://arxiv.org/abs/1603.04478).
- [8] G. Veneziano und S. Yankielowicz, „An effective lagrangian for the pure $N = 1$ supersymmetric Yang-Mills theory“, *Phys. Lett. B* **113** (1982) 231 – 236.
- [9] G. R. Farrar, G. Gabadadze und M. Schwetz, „On the Effective Action of $N = 1$ Supersymmetric Yang-Mills Theory“, *Phys. Rev. D* **58** (1998) 015009, [arXiv:hep-th/9711166](https://arxiv.org/abs/hep-th/9711166).
- [10] G. R. Farrar, G. Gabadadze und M. Schwetz, „The Spectrum of Softly Broken $N = 1$ Supersymmetric Yang-Mills theory“, *Phys. Rev. D* **60** (1999) 035002, [arXiv:hep-th/9806204](https://arxiv.org/abs/hep-th/9806204).
- [11] C. Gatttringer und C. Lang, „Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation“, Springer Science & Business Media, 2009.
- [12] I. Montvay und G. Münster, „Quantum fields on a Lattice“, Cambridge University Press, 1997.

-
- [13] G. Münster und M. Walzl, „Lattice gauge theory: A Short primer“, in „Phenomenology of gauge interactions. Proceedings, Summer School, Zuoz, Switzerland, August 13-19, 2000“, S. 127–160. 2000. [arXiv:hep-lat/0012005](#).
- [14] U.-J. Wiese, „An Introduction to Lattice Field Theory“, *15th Saalburg Summer School*, 2009.
- [15] R. Gupta, „Introduction to Lattice QCD: Course“, in „Probing the standard model of particle interactions. Proceedings, Summer School in Theoretical Physics, NATO Advanced Study Institute, 68th session, Les Houches, France, July 28-September 5, 1997. Pt. 1, 2“, S. 83–219. 1997. [arXiv:hep-lat/9807028](#).
- [16] G. Münster, „Quantentheorie“, De Gruyter, Berlin, New York, 2010.
- [17] M. E. Peskin und D. V. Schroeder, „An Introduction to Quantum Field Theory“, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1995.
- [18] K. G. Wilson, „Confinement of quarks“, *Phys. Rev. D* **10** (1974) 2445–2459.
- [19] H. Nielsen und M. Ninomiya, „Absence of neutrinos on a lattice“, *Nucl. Phys. B* **185** (1981) 20 – 40.
- [20] H. Nielsen und M. Ninomiya, „A no-go theorem for regularizing chiral fermions“, *Phys. Lett. B* **105** (1981) 219 – 223.
- [21] H. Kalka und G. Soff, „Supersymmetrie“, Teubner, 1997.
- [22] S. Luckmann, „Supersymmetrische Feldtheorien auf dem Gitter“, Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2001.
- [23] K. Demmouche, „ $\mathcal{N} = 1$ $SU(2)$ Supersymmetric Yang-Mills theory on the lattice with light dynamical Wilson gluinos“, Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2009.
- [24] D. Sandbrink, „Numerische Bestimmung von Quarkpotential, Glueball-Massen und Phasenstruktur in der $\mathcal{N} = 1$ supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie“, Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2014.
- [25] A. Ferling, „Numerische Methoden zur Erforschung einer $\mathcal{N} = 1$ Super Yang-Mills-Theorie mit $SU(2)_c$ und $SU(3)_c$ Wilson Fermionen“, Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2009.
- [26] G. Bergner, P. Giudice, G. Münster, I. Montvay und S. Piemonte, „The light bound states of supersymmetric $SU(2)$ Yang-Mills theory“, *JHEP* **03** (2016) 080, [arXiv:1512.07014](#).
- [27] I. Montvay, „Supersymmetric Yang-Mills Theory on the Lattice“, *Int. J. Mod. Phys. A* **17** (2002) 2377–2412, [arXiv:hep-lat/0112007](#).

- [28] A. Feo, P. Merlatti und F. Sannino, „Information on the Super Yang-Mills spectrum“, *Phys. Rev. D* **70** (2004) 096004, [arXiv:hep-th/0408214](#).
- [29] G. Curci und G. Veneziano, „Supersymmetry and the lattice: A reconciliation?“, *Nucl. Phys. B* **292** (1987) 555 – 572.
- [30] G. Bergner, T. Berheide, G. Münster, U. D. Özugurel, D. Sandbrink und I. Montvay, „The gluino-gluon particle and finite size effects in supersymmetric Yang-Mills theory“, *JHEP* **09** (2012) 108, [arXiv:1206.2341](#).
- [31] I. Montvay, „An Algorithm for Gluinos on the Lattice“, *Nucl. Phys. B* **466** (1996) 259–284, [arXiv:hep-lat/9510042](#).
- [32] G. Bergner, „Complete supersymmetry on the lattice and a No-Go theorem“, *JHEP* **01** (2010) 024, [arXiv:0909.4791](#).
- [33] G. Münster und H. Stüwe, „The mass of the adjoint pion in $\mathcal{N} = 1$ supersymmetric Yang-Mills theory“, *JHEP* **05** (2014) 034, [arXiv:1402.6616](#).
- [34] **DESY-Münster-Roma** Collaboration, F. Farchioni, C. Gebert, R. Kirchner, I. Montvay, A. Feo, G. Münster, T. Galla und A. Vladikas, „The supersymmetric Ward identities on the lattice“, *Eur. Phys. J. C* **23** (2002) 719–734, [arXiv:hep-lat/0111008](#).
- [35] K. Symanzik, „Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 1. Principles and ϕ^4 Theory“, *Nucl. Phys. B* **226** (1983) 187–204.
- [36] K. Symanzik, „Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 2. $O(N)$ Nonlinear Sigma Model in Perturbation Theory“, *Nucl. Phys. B* **226** (1983) 205–227.
- [37] K. Demmouche, F. Farchioni, A. Ferling, I. Montvay, G. Münster, E. E. Scholz und J. Wuilloud, „Simulation of 4d $\mathcal{N} = 1$ supersymmetric Yang-Mills theory with Symanzik improved gauge action and stout smearing“, *Eur. Phys. J. C* **69** (2010) 147–157, [arXiv:1003.2073](#).
- [38] C. Morningstar und M. J. Peardon, „Analytic smearing of SU(3) link variables in lattice QCD“, *Phys. Rev. D* **69** (2004) 054501, [arXiv:hep-lat/0311018](#).
- [39] A. Donini, M. Guagnelli, P. Hernandez und A. Vladikas, „Towards $N = 1$ Super-Yang-Mills on the Lattice“, *Nucl. Phys. B* **523** (1998) 529–552, [arXiv:hep-lat/9710065](#).
- [40] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller und E. Teller, „Equation of State Calculations by Fast Computing Machines“, *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 1087–1092.

- [41] I. Montvay und E. Scholz, „Updating algorithms with multi-step stochastic correction“, *Phys. Lett. B* **623** (2005) 73–79, [arXiv:hep-lat/0506006](#).
- [42] **Ape** Collaboration, M. Albanese, F. Costantini, G. Fiorentini, F. Flore, M. Lombardo, R. Tripiccion, P. Bacilieri, L. Fonti, P. Giacomelli, E. Remiddi, M. Bernaschi, N. Cabibbo, E. Marinari, G. Parisi, G. Salina, S. Cabasino, F. Marzano, P. Paolucci, S. Petrarca, F. Rapuano, P. Marchesini und R. Rusack, „Glueball masses and string tension in lattice QCD“, *Phys. Lett. B* **192** (1987) 163 – 169.
- [43] **UKQCD** Collaboration, C. R. Allton, C. T. Sachrajda, R. M. Baxter, S. P. Booth, K. C. Bowler, S. Collins, D. S. Henty, R. D. Kenway, B. J. Pendleton, D. G. Richards, J. N. Simone, A. D. Simpson, B. E. Wilkes und C. Michael, „Gauge-invariant smearing and matrix correlators using Wilson fermions at $\beta = 6.2$ “, *Phys. Rev. D* **47** (1993) 5128–5137.
- [44] C. Best, M. Göckeler, R. Horsley, E.-M. Ilgenfritz, H. Perlt, P. E. L. Rakow, A. Schäfer, G. Schierholz, A. Schiller und S. Schramm, „Pion and Rho Structure Functions from Lattice QCD“, *Phys. Rev. D* **56** (1997) 2743–2754, [arXiv:hep-lat/9703014](#).
- [45] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu und F. Laloë, „Quantum Mechanics, Volume 2“, Wiley, 1992.
- [46] M. Lüscher und U. Wolff, „How to calculate the elastic scattering matrix in two-dimensional quantum field theories by numerical simulation“, *Nucl. Phys. B* **339** (1990) 222 – 252.
- [47] B. Blossier, M. Della Morte, G. von Hippel, T. Mendes und R. Sommer, „On the generalized eigenvalue method for energies and matrix elements in lattice field theory“, *JHEP* **04** (2009) 094, [arXiv:0902.1265](#).
- [48] C. Gattlinger, „Excited hadrons on the lattice“, in „NSTAR 2007: Proceedings of The 11th Workshop on The Physics of Excited Nucleons, 5–8 September 2007, Bonn, Germany“, H.-W. Hammer, V. Kleber, U. Thoma und H. Schmieden, Hrsg., S. 1–6. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2008.
- [49] A. C. Lichtl, „Quantum Operator Design for Lattice Baryon Spectroscopy“, Dissertation, Carnegie Mellon University, 2006. [arXiv:hep-lat/0609019](#).
- [50] M. S. Mahbub, A. Ó. Cais, W. Kamleh, B. G. Lasscock, D. B. Leinweber und A. G. Williams, „Isolating Excited States of the Nucleon in Lattice QCD“, *Phys. Rev. D* **80** (2009) 054507, [arXiv:0905.3616](#).
- [51] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, „Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing“, Cambridge University Press, New York, NY, USA, 3. Ed., 2007.

- [52] N. Madras und A. D. Sokal, „The pivot algorithm: A highly efficient Monte Carlo method for the self-avoiding walk“, *J. Statist. Phys.* **50** (1988) 109–186.
- [53] **ALPHA** Collaboration, U. Wolff, „Monte Carlo errors with less errors“, *Comput. Phys. Commun.* **156** (2004) 143–153, [arXiv:hep-lat/0306017](#), [Erratum: *Comput. Phys. Commun.* **176** (2007) 383].
- [54] W. Janke, „Statistical Analysis of Simulations: Data Correlations and Error Estimation“, in „Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms“, J. Grotendorst, D. Marx und A. Muramatsu, Hrsg., Bd. 10 aus *NIC Series*, S. 423–445, John von Neumann Institute for Computing, Jülich. 2002.
- [55] H. Flyvbjerg und H. G. Petersen, „Error estimates on averages of correlated data“, *J. Chem. Phys.* **91** (1989) 461–466.
- [56] K. Osterwalder und R. Schrader, „Axioms for Euclidean Green’s functions“, *Comm. Math. Phys.* **31** (1973) 83–112.
- [57] K. Osterwalder und R. Schrader, „Axioms for Euclidean Green’s functions II“, *Comm. Math. Phys.* **42** (1975) 281–305.
- [58] H. D. Young, „Statistical Treatment of Experimental Data“, McGraw-Hill New York, 1962.
- [59] M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth und F. Rossi, „GNU Scientific Library Reference Manual“, Network Theory, Bristol, 3. Ed., 2009.
- [60] R. Andrae, T. Schulze-Hartung und P. Melchior, „Dos and don’ts of reduced chi-squared“, [arXiv:1012.3754](#).
- [61] A. Ó. Cais, D. Leinweber, S. Mahbub und T. Williams, „A Fitting Robot for Variational Analysis“, *PoS LATTICE2008* (2008) 137, [arXiv:0812.1872](#).
- [62] M. S. Mahbub, „Excitations of the nucleon in lattice QCD“, Dissertation, University of Adelaide, 2010.
- [63] C. N. Papanicolas und E. Stiliaris, „A novel method of data analysis for hadronic physics“, [arXiv:1205.6505](#).
- [64] C. Alexandrou, T. Leontiou, C. N. Papanicolas und E. Stiliaris, „Novel analysis method for excited states in lattice QCD: The nucleon case“, *Phys. Rev. D* **91** (2015) 014506, [arXiv:1411.6765](#).
- [65] S. Ali, G. Bergner, H. Gerber, P. Giudice, I. Montvay, G. Münster und S. Piemonte, „Simulations of $\mathcal{N} = 1$ supersymmetric Yang-Mills theory with three colours“, *PoS LATTICE2016* (2016) 222, [arXiv:1610.10097](#).

Danksagung

Für die zur Verfügung gestellte Rechenzeit auf den Clustern PALMA, PALMA-NG und NWZPHI der Westfälischen Wilhelms-Universität und auf dem Cluster JURECA am Jülich Supercomputing Centre möchte ich herzlich danken.