

Gitter-QCD mit leichten Wilson-Quarks

Chirale Störungstheorie in der Twisted-Mass-Formulierung
und aktuelle Simulationen

Tobias Sudmann

2009



Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Gitter-QCD	3
1.1 Gitter-Formulierungen	3
1.2 Twisted-Mass-QCD	8
1.3 Twisted-Mass-Gitter-QCD	10
1.4 Gitterartefakte	14
2 Chirale Störungstheorie	17
2.1 Spontane Symmetriebrechung	17
2.2 Kontinuum	19
2.3 Gitter	22
2.4 Zwei-Flavour-Twisted-Mass- χ PT	24
2.5 Twisted-Mass-Phasendiagramm	31
2.6 Axialstrom	34
2.7 „Partially quenched“ χ PT	38
2.8 Verallgemeinerte Fits	42
3 Twisted-Mass-Gitter-QCD mit zwei leichten Quarks	47
3.1 Simulation	47
3.2 „Finite Size“-Effekte	48
3.3 Störungstheoretische Analyse	57
4 Twisted-Mass-Gitter-QCD mit 2 + 1 + 1 leichten Quarks	69
4.1 Motivation	69
4.2 Simulation	70
4.3 χ PT für 2 + 1 + 1 Quarks	72
5 Ein-Flavour-QCD	89
5.1 Motivation	89
5.2 Simulation	91
5.3 Resultate	94
5.4 PQ χ PT für Ein-Flavour-QCD	99
5.5 „Partially Quenched“-Analyse	103
Zusammenfassung	107

A	Generatoren der $SU(N_f)$	109
B	Größen der chiralen Störungstheorie	113
C	Renormierungskoeffizienten	115
D	Lagrangedichte für $2 + 1 + 1$ Flavour	117
	Literaturverzeichnis	121

Einleitung

Nach dem gegenwärtigen Stand der Forschung liegen den bekannten physikalischen Phänomenen vier unterschiedliche Grundkräfte zu Grunde: die Gravitation, der Elektromagnetismus sowie die schwache und die starke Wechselwirkung. Die drei letztgenannten sind für die Elementarteilchenphysik relevant und werden im Rahmen der Quantenfeldtheorie beschrieben. Sie basieren auf einer lokalen Eichsymmetrie, welche die fundamentalen Eigenschaften der jeweiligen Kraft festlegt. Die elektromagnetische und die schwache Wechselwirkung werden durch die elektroschwache $SU(2) \times U(1)_Y$ -Eichsymmetrie beschrieben, die durch den Higgs-Mechanismus spontan zur $U(1)_{\text{em}}$ gebrochen wird. Die theoretische Grundlage der starken Wechselwirkung ist die Quantenchromodynamik (QCD), welche als nicht-abelsche Colour- $SU(3)$ -Eichsymmetrie formuliert ist.

Die elektroschwache Wechselwirkung kann sehr erfolgreich durch störungstheoretische Ansätze untersucht werden. Die Struktur der starken Wechselwirkung macht dagegen ein solches Vorgehen teilweise unmöglich. Um die Eigenschaften des Teilchenspektrums bei niedrigen Energien zu untersuchen, ist es notwendig, numerische Methoden zu verwenden. Diese basieren auf einer Formulierung der Quantenfeldtheorie auf einem diskreten Raumzeit-Gitter; im Fall der Quantenchromodynamik spricht man kurz von *Gitter-QCD*. In Kapitel 1 werden mögliche Formulierungen dieser Theorie und ihre Eigenschaften erläutert.

Noch Anfang der 1990er Jahre schien es aussichtslos, auf absehbare Zeit numerische Simulationen durchzuführen, in denen realistische Parameter verwendet werden können. Aufgrund unterschiedlicher Entwicklungen hat die Gitter-QCD in den letzten Jahren riesige Fortschritte gemacht. Es stehen aktuell Maschinen zur Verfügung, die mit einer Rechenleistung von mehreren 100 Teraflops aufwarten – eine Verbesserung um den Faktor 1000 in weniger als 20 Jahren. Des Weiteren haben sich die Algorithmen gerade in den letzten Jahren deutlich verbessert und das Skalenverhalten der Simulationen optimiert. Nicht zuletzt haben alternative Gitterformulierungen zu dieser Entwicklung entscheidend beigetragen: die Twisted-Mass-Formulierung schafft es z. B., die verbleibenden Gitterartefakte erheblich zu reduzieren.

Zur Zeit werden sehr viele unterschiedliche Aspekte der QCD durch numerische Simulationen untersucht, von denen drei in dieser Arbeit betrachtet werden. Kapitel 3 zeigt die Resultate von dynamischen Simulationen mit zwei leichten Quarks, die bei realistischen Quarkmassen in Twisted-Mass-QCD durchgeführt werden. Die Ergebnisse lassen sich im Rahmen der chiralen Störungstheorie analysieren, deren Grundlage in Kapitel 2 erläutert wird.

Im Anschluss wird in Kapitel 4 ein Ausblick auf aktuelle Twisted-Mass-Simulationen mit vier

dynamischen Quarks gegeben. Es werden die grundsätzlichen Eigenschaften dieser Situation dargestellt und die strukturellen Zusammenhänge störungstheoretisch untersucht.

Im abschließenden fünften Kapitel wird eine unkonventionelle QCD mit einem Quark-Flavour betrachtet. Dieser Theorie fehlen einige der grundsätzlichen Eigenschaften der realen QCD. Sie bietet sich dennoch als Experimentierfeld an, um einige spezielle Eigenschaften der QCD zu untersuchen. Dazu gehören eine mögliche spontane CP -Verletzung und auch der Zusammenhang zur supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie.

1 Gitter-QCD

1.1 Gitter-Formulierungen

Die Eichsymmetrie der QCD wird durch die nicht-abelsche Colour-SU(3) Eichgruppe beschrieben. Die Struktur dieser Theorie unterscheidet sich fundamental von der abelscher Theorien wie z. B. der Quantenelektrodynamik (QED). Der nicht-kommutative Charakter führt zu einer Wechselwirkung der Eichbosonen untereinander, was einige der zentralen Eigenschaften der QCD zur Folge hat.

Wie in der QED wird durch virtuelle Teilchen-Antiteilchen-Paare das Vakuum polarisiert und die Kraft dadurch abgeschirmt. Durch die Wechselwirkung der Gluonen miteinander wird diese Abschirmung aber überabsorbiert und damit umgekehrt. Die Stärke der Kopplung hängt wie folgt von der Energieskala ab: Bei großen Energien (kleinen Abständen) wird die Kopplung schwächer, was i. Allg. mit „Asymptotischer Freiheit“ bzw. *asymptotic freedom* bezeichnet wird. Auf dieser Energieskala können zur Bestimmung vieler Größen ähnliche störungstheoretische Ansätze wie in der QED bei kleinen Energien verwendet werden. Bei kleinen Energien (großen Abständen) wird die Kopplung aber immer stärker, hier versagen die aus der QED bekannten Methoden. In diesem Regime treten die Freiheitsgrade der Theorie, Quarks und Gluonen, nur in „farbneutralen“ gebundenen Zuständen auf, man spricht deswegen von „Farbeinschluss“ bzw. *colour confinement*.

In den 1970er Jahren wurde von Wilson eine Alternative zur perturbativen Behandlung von Eichtheorien entwickelt. Diese sog. „Gitter-Regularisierung“ ist eine nicht-perturbative Methode, um Eichtheorien zu untersuchen. Bis heute stellt sie die einzige bekannte Möglichkeit dar, um die zur Beschreibung der Eigenschaften der Mesonen und Baryonen relevante QCD bei kleinen Energien erfolgreich zu behandeln. Die grundlegenden Einschränkungen dieser Gitter-QCD liegen zum einen darin, dass das Gitter eine diskrete räumliche Struktur hat, und zum anderen, dass bei numerischer Herangehensweise die Ausdehnung des Gitters praktischerweise endlich und die Metrik zudem euklidisch statt Minkowskisch ist.

1.1.1 Euklidische QCD

Im Pfadintegralformalismus der Quantenfeldtheorie hat der Boltzmann-Faktor ein imaginäres Argument, so dass dieser oszilliert. Erweitert man die reelle Zeit in die komplexe Ebene und

dreht diese auf die rein imaginäre Achse, spricht man von einer *Wick-Rotation*. In imaginärer Zeit ist so das Argument des Boltzmann-Faktors reell und das Pfadintegral beschreibt dann ein statistisches System. Dies macht die Anwendung statistischer Methoden grundsätzlich möglich und damit die Computer-basierten Simulationen der Gitter-QCD.

Die eigentliche Wick-Rotation wird durchgeführt, um die zeitgeordneten Greens-Funktionen aus den euklidischen Greens-Funktionen (Schwinger-Funktionen) zu erhalten. Dies wird durch eine Drehung um $\pi/2$ gegen den Uhrzeigersinn erreicht. Damit die euklidischen Korrelationsfunktionen in den physikalischen Minkowski-Raum fortgesetzt werden können, müssen diese gewisse Bedingungen erfüllen, um der Rotation eine mathematische Grundlage zu geben; dazu gehört insbesondere die sog. *Osterwalder-Schrader-Reflexions-Positivität*. Diese stellt sicher, dass ein Hilbert-Raum mit einer wohldefinierten Hamilton-Funktion konstruiert werden kann.

Um die euklidische Lagrangedichte der QCD zu formulieren, ersetzt man den minkowskischen metrischen Tensor

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

durch den euklidischen

$$g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} = \mathbb{1} .$$

Üblicherweise wird durch die formale Ersetzung der Zeit $x_4 = ix_0$ auch die Indizierung der Größen geändert. Die Lagrangedichte der QCD in euklidischer Raumzeit besteht aus zwei Teilen

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \sum_f \bar{q}_f(x) (\gamma_\mu D_\mu + m_f) q_f(x) + \frac{1}{4} F_a^{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}^a(x). \quad (1.1)$$

Der hintere setzt sich nur aus den Eichfeldern A_μ^a zusammen, da der Feldstärketensor

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c$$

allein durch diese definiert ist; f^{abc} sind die Strukturkonstanten der Eichgruppe, siehe Appendix A. Die zugehörige Wirkung wird deswegen als *Eichwirkung* S_G bezeichnet. Im vorderen Teil der Dichte wird die Dynamik der Fermionfelder $q_f(x)$ beschrieben, die über die Eichfelder in der kovarianten Ableitung

$$D_\mu = \partial_\mu - ig A_\mu^a \frac{\lambda_a}{2}$$

wechselwirken; λ_a sind die Generatoren der Eichgruppe. Dieser Teil der Wirkung S_F heißt *Fermionwirkung*.

Die oben angegebene Lagrangedichte der QCD ist aber nicht die allgemeinste, die invariant bzgl. der Eichgruppe $SU(3)$ ist. Es kann prinzipiell auch noch ein zusätzlicher Term, der sog. θ -Term, auftauchen, der konventionsgemäß

$$\mathcal{L}_\theta = \frac{g^2 \bar{\theta}}{64\pi^2} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \sum_a F_{\mu\nu}^a F_{\rho\sigma}^a$$

lautet. Dieser Term bricht explizit die CP - und P -Symmetrie und wird in Kapitel 5 aufgegriffen. Der gegenwärtige Stand ist, dass θ zumindest sehr klein ist und deswegen wird dieser zusätzliche Parameter im Folgenden nicht berücksichtigt. Es ist nicht geklärt, warum dieser Term so klein oder gar null ist.

1.1.2 Wilson-Formulierung

Die Fermionfelder oder konkreter die Quarkfelder q_f können auf dem Gitter nur noch an ausgezeichneten Orten lokalisiert sein, den Gitterpunkten. Auf einem isotropen Gitter haben diese Punkte in jede Raumzeit-Richtung μ einen festen Abstand a voneinander und können durch ganze Zahlen $n = x/a$ identifiziert werden. Der Einfachheit halber werden die Gitterpunkte aber wie im Kontinuum weiter mit x bezeichnet. Die Eichfelder als Übermittler der Wechselwirkung sind nur noch auf den Verbindungslinien von x nach $x + \hat{\mu}$ definiert ($\hat{\mu}$ ist Einheitsvektor in μ -Richtung), wobei unter Berücksichtigung der Eichgruppe ein solcher *Link* durch die Linkvariable

$$U_\mu(x) = \exp\left(igaA_\mu^b(x)\lambda_b\right)$$

beschrieben wird. Der einfachste geschlossene Pfad solcher Linkvariablen

$$U_{\mu\nu}(x) = U_{-\nu}(x + \hat{\nu}) U_{-\mu}(x + \hat{\mu} + \hat{\nu}) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu(x)$$

heißt *Plaquette*. Mit dieser Plaquette kann die Eichwirkung der QCD auf dem Gitter z. B. durch

$$S_G[U] = \beta \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{Re} \langle 1 - \frac{1}{N_c} U_{\mu\nu}(x) \rangle$$

formuliert werden; für die Spur wird hier wie üblich die Notation $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(\dots)$ verwendet. Dies ist die Wilson-Plaquette-Wirkung der $SU(N_f)$ -Eichwirkung mit N_c Quarkfarben, deren Kopplungsstärke durch

$$\beta = \frac{2N_c}{g^2}$$

gegeben ist. Diese Formulierung ist prinzipiell recht unproblematisch, auch wenn häufig andere Wirkungen benutzt werden, um verschiedene Eigenschaften zu verbessern.

Anders verhält es sich dagegen mit der zunächst allgemein formulierten Fermionwirkung

$$S_F = \sum_{x,y} \bar{q}_f(y) Q[y, x, U] q_f(x), \quad (1.2)$$

die sich naiv nicht ohne Probleme auf das Gitter übersetzen lässt; Q ist hier eine nicht weiter spezifizierte Dirac-Matrix. Die Ursache dafür ist, dass aufgrund der endlichen Gitterlänge a ein Impuls-Cut-Off eingeführt worden ist, der dazu führt, dass der Fermionpropagator der naiven Diskretisierung

$$\frac{-i\gamma_\mu a\bar{p}_\mu + am}{(a\bar{p}_\mu)^2 + (am)^2}, \quad \bar{p}_\mu = \frac{1}{a} \sin(ap_\mu)$$

nicht nur eine Polstelle im Minimum, sondern auch in allen Ecken der Brillouin-Zone hat. Statt eines hat man in vier Dimensionen also gleich $2^4 = 16$ Fermionen in der Theorie, sog. „Doppler“. Wilsons Formulierung der Fermionwirkung ist einer von vielen Ansätzen, dieses Problem zu umgehen [1, 2]. Durch das Hinzufügen eines weiteren Terms, der für $a \rightarrow 0$ verschwindet, wird die Masse m der unerwünschten Doppler jeweils um einen Beitrag $\sim r/a$ verschoben, so dass die Fermionmasse im Kontinuumslimit divergiert. Die zugehörige Dirac-Matrix Q lautet

$$Q[y, x, U] = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} \left[\delta_{x+\hat{\mu},y} U_{\mu}(x) [r - \gamma_{\mu}] + \delta_{x-\hat{\mu},y} U_{\mu}(x - \hat{\mu})^{\dagger} [r + \gamma_{\mu}] \right],$$

mit dem sog. *Hopping-Parameter*

$$\kappa = \frac{1}{2am + 8r}.$$

Für den Wilson-Parameter $0 < r \leq 1$, der den Dopplern die zusätzliche Masse verleiht, wird häufig die Wahl $r = 1$ getroffen. Die durch diese Dirac-Matrix beschriebenen Fermionen heißen *Wilson-Fermionen*.

Ein wesentlicher Nachteil dieser Wirkung ist die Tatsache, dass der zusätzliche Parameter die chirale Symmetrie der Theorie explizit bricht. Dennoch erwartet man, dass diese im Kontinuumslimit wiederhergestellt wird.

1.1.3 Chirale Symmetrie

Vergleicht man die Quarkmassen mit typischen hadronischen Größen, sind zumindest das *up*-, *down*- und *strange*-Quark sehr leicht. Für die beiden erstgenannten, aber auch für das *strange*-Quark sind masselose Quarks eine recht gute, erste Approximation. Eine so vereinfachte und auf diese leichten Quarks reduzierte Lagrangedichte hat interessante Eigenschaften. Projiziert man aus den Quarkfeldern ihre links- und rechtshändigen Komponenten $q_{f,L}$ und $q_{f,R}$ heraus, so lässt sich auch der fermionische Teil der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}}^0 = \bar{q}_{f,L} \gamma_{\mu} D_{\mu} q_{f,L} + \bar{q}_{f,R} \gamma_{\mu} D_{\mu} q_{f,R}$$

in einen links- und einen rechtshändigen Anteil aufspalten. Im masselosen Grenzfall besitzt die Lagrangedichte eine globale $U(N_f)_L \times U(N_f)_V$ -Symmetrie, mit der nach dem Noether-Theorem erhaltene Ströme verbunden sind. Da der axiale Singulettstrom aufgrund einer Quanten-Anomalie nicht erhalten bleibt und das für die Quarkzahlerhaltung verantwortliche vektorielle Singulett stets erhalten ist, werden diese im Folgenden nicht weiter betrachtet. Aufgrund der kleinen Quarkmassen ist eigentlich zu erwarten, dass die verbliebene $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$ -Symmetrie sich zumindest näherungsweise im Spektrum widerspiegelt. Dies ist aber nicht der Fall und die explizite Symmetriebrechung durch die kleinen Quarkmassen reicht nicht aus, um diesen Umstand zu erklären.

Spontane Symmetriebrechung

Ein Symmetrie heißt *spontan gebrochen*, wenn der Grundzustand eines Systems nicht invariant unter einer ganzen Symmetriegruppe G der Wirkung, sondern lediglich invariant bezüglich einer Untergruppe H ist.

Von besonderem Interesse ist hier der Fall einer kontinuierlichen Symmetriegruppe, deren Dimension durch die Anzahl ihrer Generatoren n_G gegeben ist. Ist nun der Grundzustand nur invariant unter einer Gruppe H mit der Dimension n_H , dann sagt das *Goldstone-Theorem* die Existenz von

$$\dim G/H = n_G - n_H$$

masselosen *Goldstone-Bosonen* voraus. In der QCD werden die pseudoskalaren Mesonen wie Pionen oder Kaonen mit diesen identifiziert. Hierin liegt auch der Ansatz der chiralen Störungstheorie für Mesonen begründet, die eine effektive Beschreibung dieser Teilchen nahe dem masselosen Grenzfall liefern soll, siehe Kapitel 2. Wird die Symmetrie zudem explizit durch kleine Quarkmassen gebrochen, bekommen diese Mesonen kleine Massen, man spricht dann auch von Pseudo-Goldstone-Bosonen.

Durch die explizite Brechung der chiralen Symmetrie bleiben i. Allg. auch der Axialstrom A_μ^a und der Vektorstrom V_μ^a nicht erhalten. Im Fall vollständig entarteter Quarkmassen bleibt zumindest der Vektorstrom erhalten, was bei den zwei leichtesten Quarks fast realisiert ist.

Die spontan gebrochene chirale Symmetrie ist eine grundlegende Eigenschaft der QCD. Diese Brechung erklärt das Teilchenspektrum und ist insbesondere die Ursache für die Existenz der leichten Mesonen. Der weiter oben beschriebene explizite Bruch der chiralen Symmetrie bei Wilson-Fermionen ist somit auch ein Eingriff in die Struktur der QCD. Es ist daher wichtig, dass die chirale Symmetrie im Kontinuumslimites $a \rightarrow 0$ wiederhergestellt wird.

1.1.4 Weitere Fermionen

Nicht nur die Tatsache des expliziten Bruchs der chiralen Symmetrie in der Wilson-Formulierung, sondern auch andere gewünschte Verbesserungen unterschiedlicher Art führen dazu, dass eine Reihe alternativer Gitter-Formulierungen von Fermionen entwickelt wurde. Diesen ist aber durch das Nielsen-Ninomiya-Theorem eine grundsätzliche Grenze gesetzt. Dieses Theorem besagt, dass es nicht möglich ist, eine chiral invariante, lokale, translationsinvariante und bilineare Wirkung ohne Doppler auf dem Gitter zu formulieren.

Das Theorem wird durch eine Klasse von Dirac-Operatoren umgangen, denen nicht die Bedingung der chiralen Invarianz $\{D, \gamma_5\} = 0$ zu Grunde liegen. Stattdessen erfüllen diese die sog. *Ginsparg-Wilson-Relation* $\{D, \gamma_5\} = 2aD\gamma_5D$, welche zur Konsequenz hat, dass der zugehörige Fermionpropagator D^{-1} zumindest bei endlichem Abstand chiral invariant ist [3, 4]: $\{D^{-1}(x-y), \gamma_5\} = 2a\gamma_5\delta(x-y)$. Diese Ginsparg-Wilson-Fermionen, wie z. B. Domain-Wall-

oder Overlap-Fermionen, haben im Kontinuumslimit eine exakte chirale Symmetrie, sind aber ineffizienter in Bezug auf die benötigte Rechenleistung. Im Gegensatz dazu sind Staggered-Fermionen [5, 6] deutlich effektiver. Diese sind aber nicht lokal und die *Rooting*-Methode, um die Doppler loszuwerden, ist zumindest umstritten.

Es gibt aber auch Ansätze, das Bestmögliche aus dem No-Go-Theorem von Nielsen-Ninomiya herauszuholen. Diese Fermionen haben die oben aufgelisteten Eigenschaften mit der Minimalanzahl von einem Doppler. Dieser Ansatz erlebt in letzter Zeit als *Creutz-Fermionen* einen neuen Aufschwung [7, 8].

Nicht zuletzt gibt es aber auch Ansätze, die insgesamt wenig umstrittenen Wilson-Fermionen so zu modifizieren, dass mit ihnen effiziente und präzise Simulationen durchgeführt werden können. Die *Twisted-Mass-Gitter-QCD* hat mit ihrem Ansatz in den letzten Jahren damit sehr großen Erfolg gehabt und Ergebnisse von hoher Genauigkeit geliefert.

1.2 Twisted-Mass-QCD

1.2.1 Definition

Die Twisted-Mass-QCD unterscheidet sich zunächst von der QCD im Standardmodell durch die Einführung eines zusätzlichen Massenterms μ_q in einem Quarkdublett [9, 10]. Die Eigenschaften der Twisted-Mass-QCD werden somit u. a. in $N_f = 2$ QCD gut deutlich, auf die sich dieses Kapitel der Einfachheit halber auch beschränkt. Die fermionische Gitterwirkung liest sich mit zwei entarteten Quarks

$$S_F[\chi, \bar{\chi}, A_\mu] = \int d^4x \bar{\chi} [\gamma_\mu D_\mu + m'_q + i\mu_q \gamma_5 \tau_3] \chi.$$

Hier sind χ die Fermionfelder, A_μ die Eichfelder und τ_3 ist einer der Generatoren der Flavour-SU(2), siehe Appendix A. Die χ -Basis wird *twisted basis* genannt, weil sich in dieser Form durch m'_q und μ_q explizit ein (Twist-)Winkel

$$\tan(\omega) = \frac{\mu_q}{m'_q}$$

zwischen den Massen in $\mathbb{1}$ - und τ_3 -Richtung definieren lässt.

Wegen der Wahl τ_3 bleibt der Massenterm diagonal und hat damit die gewohnte Struktur. Es sei aber darauf hingewiesen, dass diese Wahl nicht notwendig ist, die analogen Aussagen können auch mit τ_1 , τ_2 oder auch τ^\pm hergeleitet werden. Die bei entarteten Quarkmassen in der Twisted-Mass-QCD üblicherweise getroffenen Bezeichnungen z. B. der Pionen π^\pm und π^0 stellen damit keine Unterscheidung aufgrund der physikalischen Isospin-Verletzung dar, sondern lediglich die Festlegung der speziellen Twist-Komponente.

Der komplexe Massenterm kann auch mit dem oben definierten Twistwinkel als

$$m'_q + i\mu_q \gamma_5 \tau_3 = e^{i\frac{\omega}{2} \gamma_5 \tau_3} m_q e^{i\frac{\omega}{2} \gamma_5 \tau_3},$$

geschrieben werden, wobei

$$m_q = \sqrt{(m'_q)^2 + \mu_q^2}.$$

Damit ist die Bedeutung des Twistwinkels offensichtlich. Werden die Fermionfelder nun einer axialen Transformation unterzogen, so dass sie in der Basis

$$\psi = e^{i\frac{\omega}{2} \gamma_5 \tau_3} \chi, \quad \bar{\psi} = \bar{\chi} e^{i\frac{\omega}{2} \gamma_5 \tau_3}$$

formuliert werden, lässt sich die Wirkung zu

$$S_F[\psi, \bar{\psi}, A_\mu] = \int d^4x \bar{\psi} [\gamma_\mu D_\mu + m_q] \psi$$

umformen. Das ist aber gerade die bekannte QCD-Wirkung, weswegen die ψ -Basis auch als *physical basis* bezeichnet wird. Im Kontinuum ist somit die Twisted-Mass-QCD äquivalent zur QCD des Standardmodells. Damit lassen sich alle Größen, Symmetrien und andere Eigenschaften der Standard-QCD in die der Twisted-Mass-QCD „übersetzen“: So muss z. B. in der *twisted basis* aus den Komponenten m'_q und μ_q die physikalisch relevante Quarkmasse m_q bestimmt werden. So wie die Quarkmassen müssen auch andere physikalische Größen in Abhängigkeit vom Twistwinkel ω betrachtet werden.

1.2.2 Ströme, PCAC- und PCVC-Relation

Als wichtiges Beispiel werden in diesem Abschnitt die Ströme der QCD betrachtet, die vor allem im Zusammenhang mit der PCAC-Quarkmasse im nächsten Abschnitt von großer Bedeutung sind. In der *twisted basis* sind der Axial- und Vektorstrom A_μ^a und V_μ^a definitionsgemäß durch

$$A_\mu^a = \bar{\chi} \gamma_\mu \gamma_5 \frac{\tau_a}{2} \chi, \quad V_\mu^a = \bar{\chi} \gamma_\mu \frac{\tau_a}{2} \chi$$

gegeben. Übersetzt in die physikalischen Größen \hat{A}_μ^a und \hat{V}_μ^a bekommt man

$$\hat{A}_\mu^a = \bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_5 \frac{\tau_a}{2} \psi = \begin{cases} \cos(\omega) A_\mu^a + \varepsilon^{ab3} \sin(\omega) V_\mu^a, & a = 1, 2, \\ A_\mu^3, & a = 3, \end{cases} \quad (1.3)$$

$$\hat{V}_\mu^a = \bar{\psi} \gamma_\mu \frac{\tau_a}{2} \psi = \begin{cases} \cos(\omega) V_\mu^a + \varepsilon^{ab3} \sin(\omega) A_\mu^a, & a = 1, 2, \\ V_\mu^3, & a = 3. \end{cases} \quad (1.4)$$

Dies führt hier auch zur Unterscheidung von \hat{A}_μ^\pm und \hat{A}_μ^0 bzw. \hat{V}_μ^\pm und \hat{V}_μ^0 , die, wie bereits erläutert, nicht mit der physikalischen Isospin-Verletzung zusammenhängt.

Um die Erhaltungssätze für diese Ströme zu formulieren, benötigt man noch die pseudoskalaren und skalaren Dichten in der *twisted basis*

$$P^a = \bar{\chi} \gamma_5 \frac{\tau_a}{2} \chi, \quad S^0 = \bar{\chi} \frac{\tau_0}{2} \chi,$$

welche in der *physical basis* zu den Größen

$$\hat{P}^a = \bar{\psi} \gamma_5 \frac{\tau_a}{2} \psi = \begin{cases} P^a & , \quad a = 1, 2, \\ \cos(\omega)P^3 + i \sin(\omega)S^0 & , \quad a = 3, \end{cases}$$

$$\hat{S}^0 = \bar{\psi} \frac{\tau_0}{2} \psi = \cos(\omega)S^0 + i \sin(\omega)P^3$$

führen. Die Ströme A_μ^a und V_μ^a als Noetherströme der chiralen $SU(N_f)_V \times SU(N_f)_A$ -Symmetrie sind teilweise erhalten, es gilt

$$\begin{aligned} \partial_\mu A_\mu^a &= 2m'_q P^a + i2\mu_q \delta^{a3} S^0, \\ \partial_\mu V_\mu^a &= -2\mu_q \varepsilon^{ab3} P^b. \end{aligned}$$

Mit $a = 1, 2$ lässt sich somit m'_q aus der Divergenz des Axialstroms bestimmen. Für die physikalischen Größen \hat{A}_μ^a und \hat{V}_μ^a resultieren aus diesen Bedingungen wieder die aus der QCD bekannten Ward-Identitäten

$$\begin{aligned} \partial_\mu \hat{A}_\mu^a &= 2m_q \hat{P}^a, \\ \partial_\mu \hat{V}_\mu^a &= 0. \end{aligned}$$

Diese Ströme, die zugehörigen PCAC- bzw. PCVC-Relationen und die Zusammenhänge mit den Quarkmassen bekommen auf dem Gitter eine wichtige Bedeutung für die Bestimmung des Vakuums der Theorie.

1.3 Twisted-Mass-Gitter-QCD

1.3.1 Motivation

Die ursprüngliche Motivation für Twisted-Mass-Gitter-QCD ist die unzureichende Stabilität von dynamischen Wilson-Fermionen bei groben Gittern und kleinen Quarkmassen. Da der Wilson-Dirac-Operator nicht positiv nach unten beschränkt ist, können sog. *Nullmoden* auftreten, die Teile der Algorithmen instabil machen. Durch die Einführung einer von null verschiedenen Twistmasse wird der Dirac-Operator nach unten beschränkt.

Der Preis dafür ist die explizite Brechung der Isospin-Symmetrie auf dem Gitter. Auch bei entarteter *up*- und *down*-Quarkmasse sind Pionen π^\pm und π^0 nicht entartet. Allerdings bekommt man kostenlos eine weitere Eigenschaft der Twisted-Mass-Gitter-QCD geliefert: das Verschwinden der $\mathcal{O}(a)$ -Beiträge in einer großen Klasse von Observablen bei speziellen Parameterkombinationen; dazu gehören z. B. die wichtigen Größen wie Pionmasse, Zerfallskonstanten und PCAC-Quarkmasse.

1.3.2 Twisted-Mass-Wilson-Fermionen

Zunächst wird die Twisted-Mass-Wilson-Wirkung auf dem Gitter formuliert. Nach Gl. (1.2) ist die Fermionwirkung in der *twisted basis* allgemein

$$S_F = \sum_{x,y} \bar{\chi}(y) Q[y, x, U] \chi(x). \quad (1.5)$$

Diese Fermionwirkung wird mit der zusätzlichen Twistkomponente der Masse in dieser Basis durch

$$S_F[U, \chi, \bar{\chi}] = a^4 \sum_x \bar{\chi}(x) \left\{ \left[m_0 + i\gamma_5 \tau_3 \mu_0 + \frac{4}{a} \right] \chi(x) - \frac{1}{2a} \sum_{\mu} \left[U_{\mu}(x) [r - \gamma_{\mu}] \chi(x + \hat{\mu}) + U_{\mu}(x - \hat{\mu})^{\dagger} [r + \gamma_{\mu}] \chi(x - \hat{\mu}) \right] \right\}$$

beschrieben. Durch eine Reskalierung der Felder und Orte gemäß

$$\chi \rightarrow \sqrt{\frac{2\kappa}{a^3}} \chi \quad x_{\mu} \rightarrow ax_{\mu}$$

wird die Wirkung auf die Form dimensionsloser Felder in Gl. (1.5) gebracht; in diesen Feldern ist die zugehörige Dirac-Matrix

$$Q[y, x, U] = [1 + i2\kappa a \mu_0 \gamma_5 \tau_3] \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} \left[\delta_{x+\hat{\mu},y} U_{\mu}(x) [r - \gamma_{\mu}] + \delta_{x-\hat{\mu},y} U_{\mu}(x - \hat{\mu})^{\dagger} [r + \gamma_{\mu}] \right]. \quad (1.6)$$

In dieser Form wird der Unterschied zur Standard-Wilson-Formulierung gut deutlich, da ohne Twistmasse einfach der Term $i2\kappa a \mu_0 \gamma_5 \tau_3$ verschwindet.

1.3.3 Vakuum

Die explizite Brechung der Isospin-Symmetrie durch die Einführung der Twistmasse bzw. des Twistwinkels führt zu einer Verschiebung des Vakuums. Auf dem Gitter kann der zugehörige Vakuumwinkel $\hat{\omega}$ nicht-perturbativ z. B. durch den verschwindenden Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \hat{V}_{\mu}^2(x) \hat{P}^1(y) \rangle &= \cos(\hat{\omega}) \langle \partial_{\mu} V_{\mu}^2(x) P^1(y) \rangle - \sin(\hat{\omega}) \langle \partial_{\mu} A_{\mu}^1(x) P^1(y) \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

definiert werden, wobei die physikalischen Ströme und Dichten analog zu Gln. (1.3), (1.4) durch $\hat{\omega}$ bestimmt sind. Der Übersichtlichkeit wegen sind die benutzten Ströme bereits renormiert, d. h. es handelt sich um die multiplikativ renormierten Gittergrößen. Für große Abstände $|x - y|$ dominieren die Beiträge einzelner Pionen, so dass gefordert wird, dass die

Relation bei diesen Abständen gilt. Bei großem $|x - y|$ kann dann der Vakuuwinkel $\hat{\omega}$ z. B. auch durch

$$\tan(\hat{\omega}) = \frac{\langle \partial_\mu V_\mu^2(x) P^1(y) \rangle}{\langle \partial_\mu A_\mu^1(x) P^1(y) \rangle}$$

festgelegt werden, siehe Gln. (1.3), (1.4). Diese Definition ist gültig, da sich bei großen Abständen die Wirkung der Divergenzen ∂_μ im Bruch aufhebt.

1.3.4 PCAC-Quarkmasse

Die „ungetwistete“ Quarkmasse ist durch die Ward-Identität bzw. PCAC-Relation

$$\partial_\mu A_\mu^a(x) = 2m'_{\text{PCAC}} P^a(x)$$

bestimmt, wobei wegen Gln. (1.3), (1.4) $a = 1, 2$ sein muss, wenn der Twistwinkel in τ_3 -Richtung gewählt ist. Benutzt man z. B. den pseudoskalaren Strom $P^a(y)$ als Korrelator, wird die so definierte PCAC-Quarkmasse aus dem Verhältnis

$$m'_{\text{PCAC}} = \frac{\langle \partial_\mu A_\mu^a(x) P^a(y) \rangle}{2\langle P^a(x) P^a(y) \rangle}, \quad a = 1, 2$$

bestimmt. Die physikalisch relevante Quarkmasse wird dementsprechend auf Grundlage der physikalischen Ströme bestimmt, so dass diese analog durch

$$m_{\text{PCAC}} = \frac{\langle \partial_\mu \hat{A}_\mu^a(x) \hat{P}^a(y) \rangle}{2\langle \hat{P}^a(x) \hat{P}^a(y) \rangle}, \quad a = 1, 2 \quad (1.7)$$

berechnet wird.

Aus der Definition der Ströme lässt sich der Zusammenhang der gerade definierten Quarkmassen herleiten. Für den physikalischen Axialstrom der Twisted-Mass-QCD gilt die Relation

$$\cos(\hat{\omega}) \hat{A}_\mu^a = A_\mu^a + \varepsilon^{ab3} \cos(\hat{\omega}) \sin(\hat{\omega}) \hat{V}_\mu^b.$$

Setzt man diesen Strom in die Definition der PCAC-Quarkmasse m'_{PCAC} in Gl. (1.7) ein, erhält man die nicht-perturbative Beziehung

$$m'_{\text{PCAC}} = \cos(\hat{\omega}) m_{\text{PCAC}}. \quad (1.8)$$

Im Bild der komplexen Massenebene ist damit m'_{PCAC} der „horizontale“ Anteil der physikalisch relevanten PCAC-Quarkmasse. Dieser Zusammenhang ist von großer Bedeutung, denn bei endlicher physikalischer Quarkmasse m_{PCAC} gilt

$$m'_{\text{PCAC}} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \cos(\hat{\omega}) = \pm \frac{\pi}{2}.$$

So hat man mit m'_{PCAC} als Observable eine effektive Methode, die Simulationsparameter so einzustellen, dass maximaler Twist vorliegt. Hierbei müssen natürlich auch die Renormierungskonstanten der Gitterströme berücksichtigt werden.

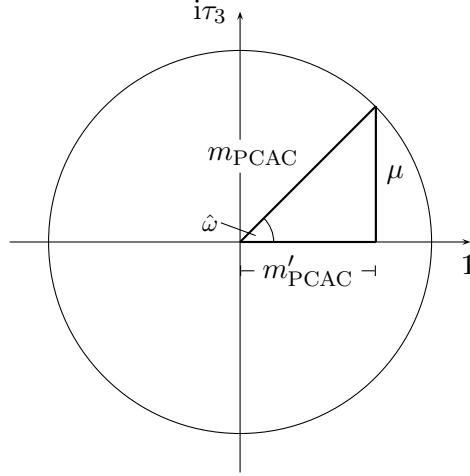


Abb. 1.1: Die PCAC-Quarkmasse in der komplexen Ebene. Die Definition des Vakuumswinkel $\hat{\omega}$ ist durch die PCAC-Quarkmassen eindeutig definiert.

Benutzt man außerdem noch die PCVC-Relation

$$\partial_\mu V_\mu^a(x) = -2\mu\varepsilon^{ab3}P^b(x)$$

der effektiven Theorie, dann lässt sich der horizontale Beitrag der PCAC-Quarkmasse aus dem Twistparameter μ und dem Vakuumswinkel $\hat{\omega}$ bestimmen:

$$m'_{\text{PCAC}} = \frac{\langle \partial_\mu A_\mu^1(x) P^1(y) \rangle}{\langle \partial_\mu V_\mu^2(x) P^1(y) \rangle} \cdot \frac{\langle \partial_\mu V_\mu^2(x) P^1(y) \rangle}{2\langle P^1(x) P^1(y) \rangle} = \frac{\mu}{\tan(\hat{\omega})}. \quad (1.9)$$

Dieser Zusammenhang ist eine spezielle Eigenschaft der Twisted-Mass-Gitter-QCD, der bei verschwindendem Vakuumswinkel nicht mehr definiert ist.

Wegen Gl. (1.8) bekommt man für die physikalisch relevante Quarkmasse

$$m_{\text{PCAC}} = \frac{\mu}{\sin(\hat{\omega})} = \sqrt{(m'_{\text{PCAC}})^2 + \mu^2}. \quad (1.10)$$

Die Bestimmung des Vakuums liefert hier unmittelbar die PCAC-Quarkmasse. Insgesamt stellt sich der Zusammenhang (1.10) in der PCAC-Quarkmassen-Ebene wie in Abb. 1.1 illustriert dar.

Betrachtet man explizit die Gitterströme, ist die unrenormierte, ungetwistete PCAC-Quarkmasse auf dem Gitter

$$m_\chi^{\text{PCAC}} = \frac{\langle \partial_\mu A_\mu^a(x) P^a(y) \rangle}{2\langle P^a(x) P^a(y) \rangle}, \quad a = 1, 2.$$

Die Beziehung zwischen der physikalischen Quarkmasse und ihren nackten Komponenten m_χ^{PCAC} und μ_0 lautet

$$m_{\text{PCAC}} = \frac{1}{Z_P} \sqrt{(Z_A m_\chi^{\text{PCAC}})^2 + \mu_0^2}. \quad (1.11)$$

In dieser Relation wird der Zusammenhang zwischen der physikalischen PCAC-Quarkmasse m^{PCAC} und den Gittergrößen durch die Renormierungskonstanten Z_A und Z_P deutlich.

1.4 Gitterartefakte

1.4.1 Symanzik improvement programme

In Abschnitt 1.1 ist die Fermionwirkung S_F der Wilson-Fermionen eingeführt worden, die in Abschnitt 1.3 zu Twisted-Mass-Wilson-Fermionen verallgemeinert wurde. Nach dem *Symanzik improvement programme* können die Eigenschaften der Wilson- oder anderer Gitter-Fermionen nahe dem Kontinuumslimit durch eine effektive Theorie mit der Wirkung

$$S_{\text{eff}} = S_{\text{QCD}} + aS_1 + a^2S_2 + \dots$$

beschrieben werden [11, 12]. Die möglichen Terme werden durch deren Dimension und durch die Symmetrien der Gittertheorie beschränkt. Die einzelnen Gitterterme sind von der Form

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

wobei \mathcal{L}_k die Dimension $4 + k$ haben muss. Auch die renormierten eichinvarianten Felder werden nahe dem Kontinuum durch ein effektives Feld

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

beschrieben. Dabei müssen die Komponenten $\phi_k(x)$ auch entsprechende Dimensionen haben. Die *on-shell*-Größen der QCD werden aus den Korrelationsfunktionen der Felder gewonnen. Eine solche Korrelationsfunktion $\langle \Phi \rangle$ wird in der effektiven Theorie bis einschließlich Ordnung a durch

$$\langle \Phi \rangle = \langle \Phi_0 \rangle_{\text{QCD}} - a \int d^4x \langle \Phi_0 \mathcal{L}_1(x) \rangle_{\text{QCD}} + a \langle \Phi_1 \rangle_{\text{QCD}}$$

beschrieben. Die Erwartungswerte werden in der Kontinuums-Theorie mit der Wirkung S_{QCD} bestimmt und des Weiteren sind

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 \rangle &= \langle \phi_0(x_1) \cdots \phi_0(x_n) \rangle, \\ \langle \Phi_1 \rangle &= \sum_k \langle \phi_0(x_1) \cdots \phi_1(x_k) \cdots \phi_0(x_n) \rangle. \end{aligned}$$

Das Ergebnis einer vollständigen Analyse von \mathcal{L}_1 liefert unter Berücksichtigung der Dimensionen und Symmetrien

$$\mathcal{L}_1 = \sum_k^5 c_k O_k$$

mit [13]

$$\begin{aligned}
O_1 &= \bar{\psi} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \psi , \\
O_2 &= \bar{\psi} D_\mu D_\mu \psi + \bar{\psi} \overleftarrow{D}_\mu \overleftarrow{D}_\mu \psi , \\
O_3 &= m \langle F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \rangle , \\
O_4 &= m \left(\bar{\psi} \gamma_\mu D_\mu \psi - \bar{\psi} \overleftarrow{D}_\mu \gamma_\mu \psi \right) , \\
O_5 &= m^2 \bar{\psi} \psi
\end{aligned}$$

in der *physical basis*. Für eine $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung der Wirkung müsste jetzt jedem dieser Terme ein Gegenterm hinzugefügt werden. Teilweise wird das schon durch eine Reparametrisierung der Quarkmassen und der Kopplung erreicht. Nach den möglichen Vereinfachungen ist die endgültige verbesserte Wirkung von der Form

$$S_{\text{impr}}[U, \bar{\psi}, \psi] = S[U, \bar{\psi}, \psi] + \delta S[U, \bar{\psi}, \psi]$$

mit

$$\delta S[U, \bar{\psi}, \psi] = a^5 \sum_x c_{\text{SW}} \frac{i}{4} \bar{\psi}(x) \sigma_{\mu\nu} \hat{F}_{\mu\nu} \psi(x) .$$

$\hat{F}_{\mu\nu}$ ist eine spezielle Gitterdarstellung des Feldstärketensors $F_{\mu\nu}$ und c_{SW} der sog. Sheikholeslami-Wohlert-Koeffizient. Dieser Parameter hängt von der Gitterwirkung und von der Kopplung ab und muss somit für $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung entsprechend eingestellt werden.

1.4.2 Automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung

Die Idee, die hinter dem allgemeinen Beweis der $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung für viele Operatoren bei maximalem Twist steht, kann wie folgt verstanden werden [14, 15]: Die Wilson-Wirkung ist invariant unter der diskreten, axialen Transformation

$$\mathcal{R}_5 : \begin{cases} \chi \rightarrow \chi' = \gamma_5 \chi \\ \bar{\chi} \rightarrow \bar{\chi}' = -\chi' \gamma_5 \end{cases} ,$$

auch \mathcal{R}_5 -Parität genannt. Diese Symmetrie kann erweitert werden, da ein gleichzeitiger Vorzeichenwechsel von r und m_0 die Wirkung ebenfalls invariant lässt:

$$\mathcal{R}_5^{\text{SP}} = \mathcal{R}_5 \times [r \rightarrow -r] \times [m_0 \rightarrow -m_0] .$$

Aufgrund dieser Symmetrie führt eine Mittelung der QCD z. B. unter Vorzeichenwechsel des Wilsonterms

$$\langle O \rangle = \frac{1}{2} [\langle O \rangle_{(r, m_0)} + \langle O \rangle_{(-r, m_0)}]$$

dazu, dass sich die Terme der Ordnung a aufgrund des umgekehrten Vorzeichens gerade aufheben. Die $\mathcal{O}(a)$ -Terme in der Symanzik-Wirkung haben unter dem Vorzeichenwechsel gerade umgekehrte Eigenschaften. In der Twisted-Mass-Wilson-Theorie ist aber

$$[r \rightarrow -r] \iff [\omega \rightarrow \omega + \pi],$$

so dass bei maximalem Twist $\omega = \pi/2$ *automatisch* die $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung erreicht wird.

2 Chirale Störungstheorie

2.1 Spontane Symmetriebrechung

Bereits in Kapitel 1 wurde erläutert, dass die chirale Symmetrie und der spontane Symmetriebruch wichtige Eigenschaften der QCD sind. Im Hinblick auf die Konstruktion einer effektiven Feldtheorie wird hier ein genauerer Blick auf die Brechung der Symmetrie und das damit verbundene Transformationsverhalten geworfen.

Nach dem Goldstone-Theorem ist die Anzahl der Goldstone-Bosonen durch die Dimension der Symmetriegruppe G und der im Bezug zum Grundzustand invarianten Untergruppe H eindeutig bestimmt. Die Transformationseigenschaften der Felder lassen sich mit Hilfe des Begriffs der Nebenklasse (Äquivalenzklasse) ableiten [16]. Eine Linksnebenklasse

$$gH = \{gh \mid h \in H\}$$

ist ein Element des Quotientenraums G/H (Faktorraum von G nach H), so dass die Menge aller dieser Klassen

$$G/H = \{gH \mid g \in G\}$$

der vollständige Quotientenraum ist. Die Goldstone-Bosonen entstehen durch die Symmetriebrechung und sind somit isomorph zu G/H . In Übereinstimmung mit dem Teilchenspektrum ist aufgrund der $SU(N_f) \times SU(N_f)$ -Symmetrie in der QCD

$$\begin{aligned} G &= \{(L, R) \mid L, R \in SU(N_f)\}, \\ H &= \{(V, V) \mid V \in SU(N_f)\}. \end{aligned}$$

Für ein Element $\tilde{g} = (\tilde{L}, \tilde{R}) \in G$ gilt wegen der Verknüpfung

$$(\tilde{L}V, \tilde{R}V) = (\tilde{L}V, \tilde{R}\tilde{L}^\dagger\tilde{L}V) = (1, \tilde{R}\tilde{L}^\dagger)(\tilde{L}V, \tilde{L}V),$$

dass

$$\tilde{g}H = \{(V, V) \mid V \in SU(N_f)\} = (1, \tilde{R}\tilde{L}^\dagger)H = (1, U)H$$

ist; $U = \tilde{R}\tilde{L}^\dagger$ ist eine $SU(N_f)$ -Matrix. Mit einem weiteren Element $g = (L, R) \in G$ ist dann das Transformationsverhalten von U durch

$$g\tilde{g}H = (1, R(\tilde{R}\tilde{L}^\dagger)L^\dagger)H = (1, RUL^\dagger)H$$

festgelegt; unter expliziter Angabe der x -Abhängigkeit der Felder ist die allgemeine Transformation

$$U(x) \longrightarrow RU(x)L^\dagger. \quad (2.1)$$

2.1.1 Felder

Mit den Generatoren λ_a der $SU(N_f)$ werden die Felder in Exponentialdarstellung durch

$$U(x) = \exp\left(\frac{i}{F_0}\lambda_a\phi_a(x)\right)$$

parametrisiert, F_0 ist hier zunächst eine unbestimmte, dimensionsbehaftete Größe. Das Mesonenspektrum im Fall $N_f = 3$ liest sich z. B.

$$\lambda_a\phi_a = \begin{pmatrix} \pi^0 + \frac{1}{\sqrt{3}}\eta & \sqrt{2}\pi^+ & \sqrt{2}K^+ \\ \sqrt{2}\pi^- & -\pi^0 + \frac{1}{\sqrt{3}}\eta & \sqrt{2}K^0 \\ \sqrt{2}K^- & \sqrt{2}K^0 & -\frac{2}{\sqrt{3}}\eta \end{pmatrix},$$

für $N_f = 2$ nimmt man die entsprechende (2×2) -Untermatrix mit ausintegriertem η . Im mesonischen Sektor sind diese Felder die Freiheitsgrade der QCD bei niedrigen Energien. Die effektive Theorie wird in diesen Freiheitsgraden formuliert.

2.1.2 Lagrangedichte

Die allgemeinste Lagrangedichte mit der niedrigsten Anzahl an Ableitungen lautet mit der in der chiralen Störungstheorie üblichen Notation $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(\dots)$

$$\frac{F_0^2}{4}\langle\partial_\mu U\partial_\mu U^\dagger\rangle,$$

wobei der Vorfaktor so gewählt ist, dass bei einer Entwicklung in den Feldern der kinetische Term

$$\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi_a)^2$$

richtig normiert ist. Unterwirft man diesen Term der Transformation

$$\partial_\mu U(x) \longrightarrow R\partial_\mu U(x)L^\dagger,$$

so sieht man sofort, dass dieser aufgrund der Zyklizität der Spur invariant ist.

Wegen der expliziten Symmetriebrechung der $SU(N_f)$ -Symmetrie durch die (leichten) Quarkmassen werden diese durch eine sog. *Spurionanalyse* systematisch der Theorie hinzugefügt. Bei dieser Analyse wird die Quarkmassenmatrix $M = m\mathbb{1}$ so behandelt, als ob sie ebenfalls unter der chiralen Transformation

$$M \longrightarrow M' = RML^\dagger$$

transformieren würde. Mit der kleinsten Anzahl an Massentermen ist

$$\frac{B_0 F_0^2}{2}\langle MU^\dagger + UM^\dagger\rangle$$

der einzige relevante Term; B_0 ist ein neuer freier Parameter der effektiven Theorie. Die Quarkmassen m werden in diesem Schema wie die quadratischen Impulse p^2 gezählt, beiden Größen ist die *chirale Dimension* $D = 2$ zugeordnet. Auf diesen Grundlagen wird die Störungstheorie systematisch aufgebaut. Die beiden hier aufgeführten Terme entsprechen der niedrigsten Ordnung dieser Entwicklung.

2.2 Kontinuum

Die chirale Störungstheorie im Kontinuum wurde basierend auf einer Arbeit von S. Weinberg [17] in den 1980er Jahren von J. Gasser und H. Leutwyler entwickelt [18, 19, 20]. Sie haben mit ihr die Struktur der QCD bei niedrigen Energien erstmals systematisch untersucht. Da die Methode darauf basiert, dass die Theorie um den *chiralen* Grenzfall in Potenzen der Quarkmassen und externen Impulse entwickelt wird, ist auch der Gültigkeitsbereich der Störungstheorie klar umrissen: Sie ist nur gültig, solange die Impulse und Quarkmassen klein gegenüber der typischen QCD-Energieskala sind. Die Systematik der Konstruktion der zugehörigen effektiven Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \sum_D \mathcal{L}_D = \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_4 + \dots$$

nach der chiralen Dimensionen D ist das sog. *Weinberg'sche Powercounting*.

In die Zählung der chiralen Dimension gehen nicht nur die Impuls- bzw. Ableitungsterme sowie die Massen ein, sondern auch die Loop-Beiträge der einzelnen Terme. Den zugehörigen Feynman-Diagrammen mit N_{2n} Vertizes mit $2n$ Impulsen und N_L unabhängigen Loops ist die chirale Dimension

$$D = 2 + 2 \sum_n N_{2n}(n-1) + 2N_L$$

zugeordnet. In führender Ordnung $D = 2$ sind somit z. B. keine Loops zu berücksichtigen, in nächstführender Ordnung $D = 4$ lediglich Ein-Loop-Diagramme.

2.2.1 Massen

Die Mesonmassen werden durch das Potential $V(\phi_a)$ der Lagrangedichte bestimmt. Auf Treelevel-Ebene ist sie allein durch den quadratischen Term

$$\frac{1}{2} M_{\phi_a}^2 (\phi_a^{\text{ren}})^2$$

gegeben. Dabei ist zu beachten, dass in höherer Ordnung die Felder nicht mehr automatisch renormiert sind. Die Renormierungskonstante

$$\phi_a^{\text{ren}} = Z_{\phi_a} \phi_a$$

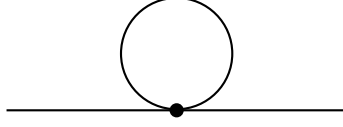


Abb. 2.1: Der abgebildete 4-Vertex trägt zum kinetischen und zum Massenterm bei. Die zugehörigen Terme in der Lagrangedichte sind von der Form $\phi_a^2 \phi_b^2$ und $(\partial_\mu \phi_a)^2 \phi_b^2$. Der erstgenannte hängt von zwei quadrierten Feldern ab. Eines durchläuft den Loop und trägt zur Masse des anderen bei und umgekehrt. Der zweite trägt sowohl zum Massen- als auch zum kinetischen Teil bei, je nachdem ob $\partial_\mu \phi_a$ im Loop ist oder außen.

ist dadurch definiert, dass in der Lagrangedichte der kinetische Term

$$\frac{1}{2}(\partial_\mu \phi_a^{\text{ren}})^2$$

die notwendige Standardform annimmt.

In nächstführender Ordnung müssen auch Ein-Loop-Beiträge bestimmt werden. Unter Beachtung der chiralen Dimension müssen bei Massen und der Feldrenormierung insgesamt drei verschiedene Diagramme berücksichtigt werden. Das einfachste ist in Abb. 2.1 dargestellt. Es beinhaltet alle Kontaktterme der Form $\phi_a^2 \phi_b^2$ und $(\partial_\mu \phi_a)^2 \phi_b^2$. Ist dem Teilchen, welches den Loop durchläuft, die Masse m und der Impuls k zugeordnet, dann ist der zugehörige Propagator

$$\frac{1}{k^2 + m^2}.$$

Dieses Loop-Teilchen trägt zur Masse des äußeren Mesons bei. Aufgrund der Topologie des Diagramms ist der Beitrag

$$\frac{1}{2} \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{1}{k^2 + m^2}.$$

Dieses Integral ist divergent und kann z. B. mittels dimensioneller Regularisierung in $d = 4 - \varepsilon$ Dimensionen berechnet werden. Mit der dadurch eingeführten Renormierungsskala Λ erhält man den Ausdruck

$$\begin{aligned} I(m^2) &= \frac{m^2}{(4\pi)^2} \left[-\frac{2}{\varepsilon} - \ln(4\pi) + \gamma_E - 1 + \ln\left(\frac{m^2}{\Lambda^2}\right) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon) \\ &= \frac{m^2}{(4\pi)^2} \left[R + \ln\left(\frac{m^2}{\Lambda^2}\right) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon); \end{aligned} \tag{2.2}$$

hier ist $\gamma_E \approx 0.577$ die Euler-Mascheroni-Konstante. Die in dieser Regularisierung auftretende divergente Kombination $R = -2/\varepsilon - \ln(4\pi) + \gamma_E - 1$ wird nach dem $\overline{\text{MS}}$ -Schema vollständig renormiert. Dies kann durch eine entsprechende Renormierung der Parameter der effektiven Theorie systematisch durchgeführt werden, siehe Appendix C. Als Renormierungsskala wird in der chiralen Störungstheorie oft $\Lambda = 4\pi F_0 \approx 1 \text{ GeV}$ verwendet.

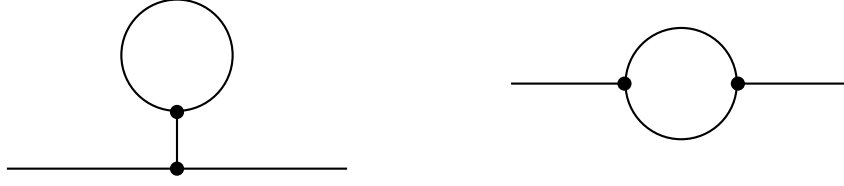


Abb. 2.2: Die abgebildeten Diagramme enthalten jeweils zwei 3-Vertizes. Die Berechnung der Loop-Beiträge wird deswegen entsprechend aufwendiger. Aufgrund der Symmetrieeigenschaften der Lagrangedichte treten diese Terme aber nicht auf.

Prinzipiell sind auch die Diagramme aus Abb. 2.2 zu berücksichtigen. Die zugehörigen Kontaktterme der 3-Vertizes $\phi_a^2\phi_b$, $(\partial_\mu\phi_a)^2\phi_b$, $(\partial_\mu\phi_a)\phi_b^2$ kommen aber aus Symmetriegründen in der Lagrangedichte nicht vor.

2.2.2 Zerfallskonstanten

Um die Zerfallskonstante der Mesonen zu bestimmen, muss die Lagrangedichte durch infinitesimale chirale Transformationen

$$L_\theta = 1 + i\theta_a^L \frac{\lambda_a}{2} + \mathcal{O}(\theta^2), \quad R_\theta^\dagger = 1 - i\theta_a^R \frac{\lambda_a}{2} + \mathcal{O}(\theta^2)$$

variiert werden. Aus diesen Variationen wird unter Berücksichtigung der Parität der Axialstrom mit

$$A_{\mu,a} = \frac{\partial(\delta_R\mathcal{L})}{\partial(\partial_\mu\theta_R)} - \frac{\partial(\delta_L\mathcal{L})}{\partial(\partial_\mu\theta_L)},$$

bestimmt; in Treelevel ist dieser proportional zu $\partial_\mu\phi_a$. Die Zerfallskonstante bestimmt sich letztendlich unter Berücksichtigung der oben errechneten Feldrenormierung aus dem Matrixelement

$$\langle 0 | A_{\mu,a} | \phi_b(\vec{p}) \rangle = ip_\mu \delta_{ab} F_\phi.$$

Auch für die Zerfallskonstante müssen Loop-Beiträge berücksichtigt werden; wegen der Topologie sind auch hier drei Diagramme möglich. Das Diagramm in Abb. 2.3 enthält keinen Vertex und beschreibt Terme der Form $\phi_c^2\partial_\mu\phi_a$. Diese liefern Loop-Beiträge, wenn ϕ_c mit Masse m den Loop durchläuft und $\partial_\mu\phi_a$ mit ϕ_b kontrahiert wird; man erhält

$$-\langle 0 | \phi_c^2 \partial_\mu \phi_a | \phi_b(\vec{p}) \rangle = ip_\mu \delta_{ab} I(m^2)$$

mit $I(m^2)$ aus Gl. (2.2).

Prinzipiell können auch für die Zerfallskonstanten Diagramme mit 3-Vertizes zu berücksichtigen sein, wie in Abb. 2.4 dargestellt. Dies ist aber erneut aufgrund der Symmetrie der Lagrangedichte nicht der Fall.

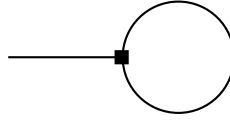


Abb. 2.3: Dieses Diagramm enthält keinen Vertex und symbolisiert Terme der Art $\phi_c^2 \partial_\mu \phi_a$. Das $\partial_\mu \phi_a$ koppelt am Rechteck an den Axialstrom A_μ^a und wird kontrahiert. Das Feld ϕ_c trägt im Loop zu dieser Kopplung bei.

Insgesamt sind für die Mesonmassen und die Zerfallskonstanten jeweils ein Ein-Loop-Diagramm zu berücksichtigen. Die Beiträge dieser Loops werden mittels dimensioneller Regularisierung jeweils als *chiraler Logarithmus* $I(m^2)$ identifiziert.

2.3 Gitter

2.3.1 Gitterterm

Auf dem Gitter wird die chirale Symmetrie zusätzlich durch den Gitterterm $A = a\mathbb{1}$ explizit gebrochen. Auch dieser Symmetriebruch wird durch eine Spurionanalyse in der Lagrangedichte der chiralen Störungstheorie berücksichtigt. Analog zum Massenterm führt diese in führender Ordnung zu

$$\frac{W_0 F_0^2}{2} \langle AU^\dagger + UA^\dagger \rangle.$$

W_0 ist der dritte Parameter, der in die chirale Gitter-Lagrangedichte in führender Ordnung eingeht. Ansonsten bleiben alle Aussagen zu den Meson-Massen und Zerfallskonstanten sowie die Loop-Beiträge und die Symmetrien der Lagrangedichte bestehen. Es müssen entweder mehr Terme berücksichtigt oder durch eine Verschiebung des Massenterms $B_0 m \rightarrow B_0 m + W_0 a$ ein einzelner verschobener Massenterm eingeführt werden. In höheren Ordnungen der Störungstheorie gibt es aber immer explizite Gitterterme.



Abb. 2.4: Relevante Loop-Diagramme mit 3-Vertex, die im Prinzip berücksichtigt werden müssen. Aus Symmetriegründen treten die zugehörigen Terme aber nicht in der Lagrangedichte auf.

2.3.2 Lagrangedichte

Um die Lagrangedichte in kompakter Form darzustellen, verwendet man die üblichen Abkürzungen

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

und verzichtet auf die explizite Darstellung von Massen- und Gitter-Term als Matrix. In nächstführender Ordnung lautet die Lagrangedichte als Funktion von χ und ρ unter Berücksichtigung der Symmetrie [21, 22]

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{NLO}} &= \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_4 \\ &= \frac{F_0^2}{4} \langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \rangle - \frac{F_0^2}{4} \langle \chi U^\dagger + U \chi^\dagger \rangle - \frac{F_0^2}{4} \langle \rho U^\dagger + U \rho^\dagger \rangle \\ &\quad - L_1 \langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \rangle^2 - L_2 \langle \partial_\mu U \partial_\nu U^\dagger \rangle^2 - L_3 \langle (\partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger)^2 \rangle \\ &\quad + L_4 \langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \rangle \langle \chi^\dagger U + U^\dagger \chi \rangle + W_4 \langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger \rangle \langle \rho^\dagger U + U^\dagger \rho \rangle \\ &\quad + L_5 \langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger (\chi^\dagger U + U^\dagger \chi) \rangle + W_5 \langle \partial_\mu U \partial_\mu U^\dagger (\rho^\dagger U + U^\dagger \rho) \rangle \\ &\quad - L_6 \langle \chi^\dagger U + U^\dagger \chi \rangle^2 - W_6 \langle \chi^\dagger U + U^\dagger \chi \rangle \langle \rho^\dagger U + U^\dagger \rho \rangle - W'_6 \langle \rho^\dagger U + U^\dagger \rho \rangle^2 \\ &\quad - L_7 \langle \chi^\dagger U - U^\dagger \chi \rangle^2 - W_7 \langle \chi^\dagger U - U^\dagger \chi \rangle \langle \rho^\dagger U - U^\dagger \rho \rangle - W'_7 \langle \rho^\dagger U - U^\dagger \rho \rangle^2 \\ &\quad - L_8 \langle \chi^\dagger U \chi^\dagger U + U^\dagger \chi U^\dagger \chi \rangle - W_8 \langle \rho^\dagger U \chi^\dagger U + U^\dagger \rho U^\dagger \chi \rangle - W'_8 \langle \rho^\dagger U \rho^\dagger U + U^\dagger \rho U^\dagger \rho \rangle. \end{aligned}$$

In dieser Form ist die Lagrangedichte die kanonische Erweiterung der Kontinuums-Variante. Dabei ist zu beachten, dass es sich bei den neu eingeführten Gasser-Leutwyler- oder auch Niederenergie-Koeffizienten L_i , W_i und W'_i um unrenormierte Größen handelt. Sie enthalten eine explizite Divergenz, die die Ein-Loop-Divergenzen $\sim R$ gerade absorbieren. Der Einfachheit halber bezeichnen die Koeffizienten im Folgenden aber lediglich den renormierten Teil *ohne* die Divergenz. Das Renormierungsschema ist in Appendix C beschrieben.

In der Literatur existieren auch unterschiedliche Ansätze, einige der Terme anders zu gliedern oder zusammenzufassen, siehe z. B. [27]. Dabei wird ausgenutzt, dass in der Lagrangedichte und somit in den physikalischen Observablen nur bestimmte Kombinationen der Koeffizienten auftreten. Der Übersichtlichkeit halber definiert man deswegen

$$\begin{aligned} L_{45} &= L_4 + L_5/2, & L_{68} &= L_6 + L_8/2, \\ W_{45} &= W_4 + W_5/2, & W_{68} &= W_6 + W_8/2, & W'_{68} &= W'_6 + W'_8/2 \end{aligned}$$

bzw. in leicht abgewandelter Form

$$L_{54} = 2L_{45}, \quad L_{86} = 2L_{68}, \quad W_{54} = 2L_{45}, \quad W_{86} = 2W_{68}, \quad W'_{86} = 2W'_{68}$$

und außerdem die in den Observablen relevanten Kombinationen

$$\widetilde{W} = W_{45} - L_{45}, \quad W = W_{68} - 2L_{68}, \quad W' = W'_{68} - W_{68} + L_{68}. \quad (2.3)$$

In der Lagrangedichte kann prinzipiell auch noch ein weiterer Term der Form

$$W_{10} \langle \partial_\mu \rho^\dagger \partial_\mu U + \partial_\mu U^\dagger \partial_\mu \rho \rangle$$

stehen, der ebenfalls für die in dieser Arbeit betrachteten Größen relevant ist. Dieser Term kann aber stets durch eine Transformation der Variablen U gemäß

$$\delta U = \frac{W_{10}}{2F_0^2} \langle U \rho^\dagger U - \rho \rangle$$

eliminiert werden. Dies führt letztendlich zu einer Verschiebung zweier (physikalischer) Koeffizienten

$$W \rightarrow W + \frac{W_{10}}{4}, \quad \widetilde{W} \rightarrow \widetilde{W} + \frac{W_{10}}{2}$$

in den Observablen, so dass dieser Term unberücksichtigt bleiben darf. Für eine qualitative Analyse der Struktur einiger Matrixelementen kann eine gesonderte Betrachtung des W_{10} -Terms dennoch nützlich sein, siehe Abschnitt 2.6.

2.4 Zwei-Flavour-Twisted-Mass- χ PT

2.4.1 Größen und Parameter

In Abschnitt 1.3 wurde gezeigt, dass durch eine Transformation der physikalischen Felder die Twisted-Mass-Gitter-QCD u. a. in der *twisted basis* und *physical basis* dargestellt werden kann. Die *twisted basis* orientiert sich an den in der Gitterwirkung verwendeten Größen und wird z. B. in den Arbeiten von S. R. Sharpe und J. M. S. Wu ausschließlich verwendet [23]. Die *physical basis* orientiert sich dagegen am störungstheoretischen Ansatz $m^2 \gg ma \gg a^2$. Dieses Vorgehen ist allerdings nicht als Einschränkung zu verstehen; die Ergebnisse sind auch außerhalb dieses Regimes gültig. Schließlich wird in beiden Darstellungen dieselbe Physik beschrieben. Die Ergebnisse sind völlig äquivalent.

Zwischen den Basen kann durch eine einfache Transformationen leicht gewechselt werden. Zur eindeutigen Unterscheidung werden im Folgenden die entsprechenden Größen definiert.

Twisted basis

Aufgrund der Verwendung dieser Basis bei Sharpe und Wu richtet sich die Wahl der Bezeichnungen und Symbole für die Größen und Parameter in erster Linie nach den dort verwendeten. In der effektiven Lagrangedichte steht zum einen die ungetwistete Quarkmasse

$$m \sim m_0 - \tilde{m}_c,$$

die sich abgesehen von der multiplikativen Renormierung aus der Differenz der nackten Quarkmasse m_0 aus der Wirkung und der kritischen Masse \tilde{m}_c zusammensetzt. Diese Differenz ist die durch die Gittersymmetrien erlaubte additive Renormierung. Die kritische Masse auf dem

Gitter \tilde{m}_c unterscheidet sich aufgrund des Gitterterms von der im Kontinuum m_c durch die Verschiebung

$$B_0\tilde{m}_c = B_0m_c + W_0a.$$

Zum anderen muss nun auch die renormierte getwistete Quarkmasse $\mu = Z_P^{-1}\mu_0$ berücksichtigt werden. Aus diesen beiden Komponenten setzt sich die physikalische Quarkmasse in der effektiven Lagrangedichte der Twisted-Mass-Gitter-QCD zusammen.

In führender Ordnung ist der gesamte symmetriebrechende Teil somit durch

$$\underbrace{2B_0(m' + i\mu)}_{\chi'} = 2B_0m + \underbrace{2W_0a}_{\rho} + i2B_0\mu$$

gegeben. Es ist zu beachten, dass unglücklicherweise hier die Bezeichnung so gewählt ist, dass $\chi' \neq 2B_0m'$ gilt. Die physikalisch relevante Quarkmasse

$$m_q = \sqrt{m'^2 + \mu^2}$$

wird deswegen zur deutlichen Abgrenzung mit einem Index q gekennzeichnet. Außerdem werden die Bezeichnungen $\chi'_0 = 2B_0m'$ und $\chi'_3 = -2B_0\mu$ verwendet, so dass

$$|\chi'| = \sqrt{\chi_0'^2 + \chi_3'^2}.$$

In führender Ordnung ist der Vakuumwinkel ω_0 durch die Verschiebung des Minimums U_0 aus dem Ursprung der Koordinaten der Pionfelder

$$\langle 0|U|0\rangle = U_0 = \frac{\chi'}{|\chi'|} = e^{i\omega_0\tau_3}$$

gegeben, so dass dieser auch durch

$$c_0 = \cos(\omega_0) = \frac{\chi'_0}{|\chi'|}, \quad s_0 = \sin(\omega_0) = \frac{\chi'_3}{|\chi'|}$$

oder $\tan(\omega_0) = \chi'_3/\chi'_0$ bestimmt werden kann.

Physical basis

In der *physical basis* wird der Twistwinkel im Gitterterm definiert, d. h. der reine Massenterm entspricht dem im Kontinuum

$$\chi_0 = 2B_0m = 2B_0(m_0 - m_c).$$

Der Gitterterm ρ setzt sich analog zum Massenterm in der *twisted basis* aus zwei Komponenten

$$\rho_0 = \rho \cos(\omega), \quad \rho_3 = \rho \sin(\omega)$$

zusammen. Damit ist in dieser Basis der Winkel durch $\tan(\omega) = \rho_3/\rho_0$ definiert. Allerdings unterscheidet sich ω von ω_0 um Terme der Ordnung a , es gilt

$$\omega = \omega_0 + \arctan\left(\frac{\rho_3}{\chi_0 + \rho_0}\right).$$

Außerdem entspricht im Kontinuum ($a = 0$) die Lagrangedichte erwartungsgemäß explizit der der gewöhnlichen QCD ohne Twistmasse.

Der vollständige symmetriebrechende Teil der Lagrangedichte liest sich schließlich

$$\chi^* = \chi_0 + \rho \cos(\omega) + i\rho \sin(\omega)\tau_3$$

und ist das Gegenstück zu χ' in der *twisted basis*.

Transformation

Die physikalischen Observablen sind unabhängig von der Basis, dennoch unterscheiden sich bestimmte verwendete Parameter, wie die Twistwinkel ω_0 und ω . Dies muss berücksichtigt werden, wenn man z. B. den Massen- und Gitterterm von der *twisted basis* χ' in die *physical basis* χ^* transformieren möchte. Die korrekte Umrechnung wird durch die chirale Transformation

$$\begin{aligned} e^{i\omega\tau_3}\chi' &= e^{i\omega\tau_3}(\chi'_0 + i\chi'_3\tau_3) \\ &= \chi'_0 \cos(\omega) - \chi'_3 \sin(\omega) + i[\chi'_3 \cos(\omega) + \chi'_0 \sin(\omega)]\tau_3 \\ &= \chi_0 + \rho \cos(\omega) + i\rho \sin(\omega)\tau_3 \\ &= \chi^* \end{aligned}$$

umgesetzt. Der Zusammenhang der Basisdarstellungen wird im nächsten Abschnitt anschaulich gemacht.

2.4.2 Basisdarstellungen

In beiden Basisdarstellungen wird der Twistwinkel im Massen- bzw. Gitterterm verschieden definiert. Die Differenz der Winkel wird hier mit θ bezeichnet: $\omega = \omega_0 + \theta$. Den Zusammenhang der Winkel in den beiden Basisdarstellungen ist in Abb. 2.5 veranschaulicht. Beim Vergleich der beiden Skizzen ist zu beachten, dass der Koordinatenursprung der komplexen Massenebene in den Darstellungen nicht identisch ist. In der Abbildung wird u. a. die Beziehung $\tan(\theta) = \rho_3/(\chi_0 + \rho_0)$ deutlich. Außerdem kann man die Zusammenhänge der Komponenten von χ' und χ^* herleiten, die sich zu

$$\begin{aligned} \chi'_0 &= \chi_0 \cos(\omega) + \rho, \\ \chi'_3 &= -\chi_0 \sin(\omega) \end{aligned}$$

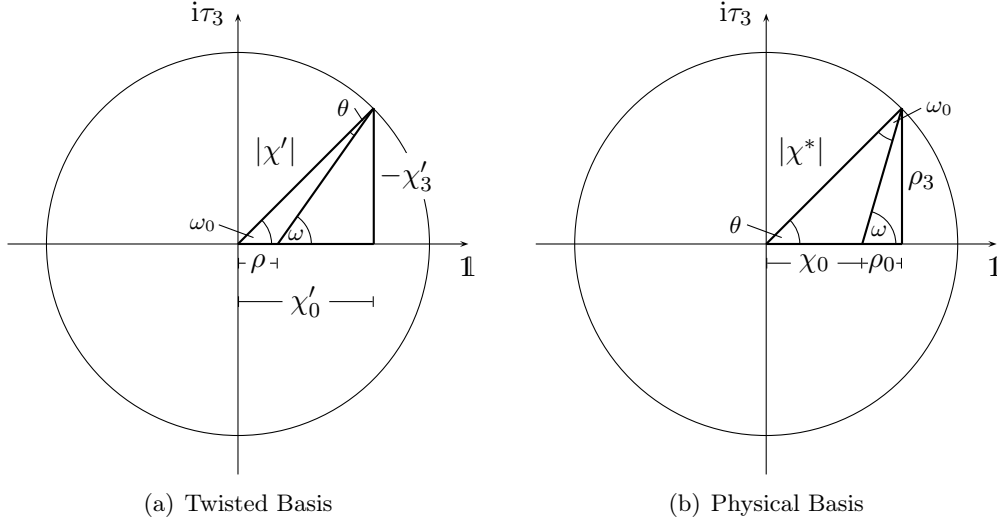


Abb. 2.5: Die getwistete Masse in der komplexen Massenebene, der Ursprung der Ebenen ist nicht identisch. Die Definitionen der Twist-Winkel ω and ω_0 in den Größen der „Twisted basis“ und „Physical basis“ sind abzulesen. Der Unterschied θ ist von Ordnung a .

auflösen lassen.

Die beiden Definitionen des Twistwinkels sind nicht nur im Zusammenhang der Basisdarstellung von Bedeutung, sondern auch unmittelbar mit dem Vakuumwinkel $\hat{\omega}$ der Twisted-Mass-Gitter-QCD verbunden. In der Untersuchung der *twisted basis* wurde bereits gezeigt, dass ω_0 mit diesem zumindest in führender Ordnung übereinstimmt.

Massen in führender Ordnung

Unabhängig von der Basisdarstellung sind die Pionmassen in führender Ordnung

$$m_\pi^2 = 2B_0 m_q = |\chi'| = |\chi^*|.$$

Mit lateinischen Kleinbuchstaben wird im Folgenden in perturbativen Formeln eine Größe in führender Ordnung gekennzeichnet: z. B. m_π^2 oder f_π . Größen in nächstführender Ordnung werden dagegen mit Großbuchstaben symbolisiert: M_π^2 , F_π .

2.4.3 Der Vakuumwinkel $\hat{\omega}$

Ein nichtverschwindender Twistwinkel führt zu einer Verschiebung des Vakuums aus dem Ursprung der Feldkoordinaten zu U_0 . Für die physikalischen Felder $\hat{U}(x)$ gilt die chirale

Relation

$$U(x) = U_0^{\frac{1}{2}} \hat{U}(x) U_0^{\frac{1}{2}},$$

die das Minimum der Lagrangedichte in den Koordinatenursprung von $\hat{U}(x)$ verschiebt. Unter dieser Transformation ist zudem gewährleistet, dass die Struktur der Kontaktterme in der Form erhalten bleibt, wie man sie aus dem Kontinuum und der ungetwisteten Gitter-Theorie kennt.

Bei einem Twistwinkel in τ_3 -Richtung wird die Verschiebung $\hat{\pi}_3 = \pi_3 - \tilde{\pi}_3$ in der chiralen Relation

$$U_0 = \exp\left(\frac{i}{F_0} \tilde{\pi}_3 \tau_3\right) = \exp(i\hat{\omega}\tau_3)$$

realisiert und definiert dadurch den Vakuumwinkel $\hat{\omega}$. Das Vakuum U_0 der Theorie wird somit eindeutig durch den Vakuumwinkel bestimmt.

Für Zwei-Flavour-QCD mit einem Twistwinkel findet man im Vakuum U_0 den Winkel

$$\begin{aligned} \hat{\omega} &= \omega_0 - \frac{8}{F_0^2} \left\{ s_0 \rho 2W + \frac{s_0 c_0 \rho^2}{m_\pi^2} 4W' \right\} \\ &= \omega - \frac{\rho_3}{m_\pi^2} - \frac{8}{F_0^2} \left\{ \rho_3 2W + \frac{\rho_0 \rho_3}{m_\pi^2} (4W' - 2W) \right\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

der hier explizit als Funktion von ω und auch ω_0 aufgeführt wird, um die Zusammenhänge zu verdeutlichen; W und W' sind durch Gl. (2.3) definiert. Durch den Vakuumwinkel sind auch die Größen

$$\hat{c} = \cos(\hat{\omega}), \quad \hat{s} = \sin(\hat{\omega})$$

festgelegt. Im Gegensatz zu diesem Winkel ist der Twistwinkel i. Allg. nicht eindeutig definiert, dieser ist nur „modulo Gittereffekte“ bestimmt. Der Vakuumwinkel stellt damit eine mögliche, aber naheliegende Definition des Twistwinkels dar. Aufgrund der Relation des Vakuumwinkels zur ungetwisteten und physikalischen PCAC-Quarkmasse in den Gln. (1.9) und (1.10) kann dieser auf dem Gitter auch adäquat gemessen werden.

Wegen der praktischen Relevanz in den Simulationen einerseits und der basisunabhängigen Definition andererseits werden im Folgenden Vakuumwinkel und Twistwinkel synonym verwendet.

2.4.4 Die PCAC-Quarkmasse

In der chiralen Störungstheorie kann man diese Beziehungen in umgekehrter Form nutzen. Hat man das Vakuum bzw. den entsprechenden Winkel bestimmt, lassen sich die PCAC-Quarkmasse $\chi_{\text{PCAC}} = 2B_0 m_{\text{PCAC}}$ und der horizontale Teil $\chi'_{\text{PCAC}} = 2B_0 m'_{\text{PCAC}}$ berechnen.

Mit dem in Gl. (2.4) bestimmten Vakuumwinkel folgt

$$\chi'_{\text{PCAC}} = \chi'_0 + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^2 \rho 2W + \hat{c} \rho^2 4W' \right\}, \quad (2.5)$$

$$\chi_{\text{PCAC}} = m_\pi^2 + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^2 \hat{c} \rho 2W + \hat{c}^2 \rho^2 4W' \right\}. \quad (2.6)$$

Im Kontinuum stimmt die PCAC-Quarkmasse m_{PCAC} mit der Quarkmasse m_q überein.

2.4.5 Pionmassen und Zerfallskonstanten

Die Pionmassen werden, wie in Abschnitt 2.2 erläutert, durch das Potential V der Lagrange-dichte und die Feldrenormierung

$$Z_\pi^{-1} = 1 + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^2 L_{54}/2 + \hat{c} \rho \widetilde{W} \right\} - \frac{m_\pi^2}{48\pi^2 F_0^2} \left[\ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) - 2R \right] \quad (2.7)$$

bestimmt; R ist die divergente Konstante im $\overline{\text{MS}}$ -Schema. Für Twisted-Mass-QCD mit zwei leichten Quarks erhält man

$$\begin{aligned} M_\pi^2 &= m_\pi^2 + \frac{m_\pi^4}{32\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) \\ &+ \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^4 (2L_{86} - L_{54}) + m_\pi^2 \hat{c} \rho (4W - 2\widetilde{W}) + \hat{c}^2 \rho^2 4W' \right\}. \end{aligned}$$

Die Zerfallskonstanten werden, wie bereits erläutert, durch eine Kopplung an die chiralen Ströme bestimmt; es ist

$$\frac{F_\pi}{F_0} = 1 - \frac{m_\pi^2}{16\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^2 L_{54}/2 + \hat{c} \rho \widetilde{W} \right\}. \quad (2.8)$$

Der Vollständigkeit halber ist auch noch die Zerfallskonstante

$$\frac{G_\pi}{B_0 F_0} = 1 - \frac{m_\pi^2}{32\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^2 (2L_{86} - L_{54}/2) + \hat{c} \rho (2W - \widetilde{W}) \right\} \quad (2.9)$$

aufgeführt, die aus dem Ein-Pion-Matrixelement der pseudoskalaren Dichte P^a berechnet wird. In NLO besteht zwischen den Größen der Zusammenhang

$$\frac{M_\pi^2}{\chi_{\text{PCAC}}} = \frac{G_\pi}{B_0 F_\pi}.$$

Da die $\mathcal{O}(a^2)$ -Beiträge der Zerfallskonstanten F_π und G_π erst in NNLO berücksichtigt werden, heben sich diese bei M_π^2 und χ_{PCAC} gerade auf. Die Pionmasse M_π^2 als Funktion der

PCAC-Quarkmasse χ_{PCAC} hat in nächstführender Ordnung keine expliziten Beiträge von Ordnung a^2 :

$$M_\pi^2 = \chi_{\text{PCAC}} + \frac{\chi_{\text{PCAC}}^2}{32\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{\chi_{\text{PCAC}}}{\Lambda^2} \right) + \frac{8}{F_0^2} \left\{ \chi_{\text{PCAC}}^2 (2L_{86} - L_{54}) + \chi'_{\text{PCAC}} \rho (2W - 2\widetilde{W}) \right\}. \quad (2.10)$$

Das Pion π_3 unterscheidet sich von den anderen, da der Twistwinkel mit dem Generator τ_3 implementiert ist. Diese Differenz

$$M_\pi^2 - M_{\pi_3}^2 = \frac{16\rho^2 \hat{s}^2}{F_0^2} (L_{86} - W_{86} + W'_{86})$$

ist von Ordnung a^2 und ist null bei verschwindendem Twistwinkel.

Außerdem kann die physikalische Verletzung der Isospin-Symmetrie explizit berücksichtigt werden, also $m_u \neq m_d$. Diese Massenaufspaltung muss orthogonal zum Twistwinkel aufgenommen werden, damit die Quarkdeterminante positiv ist [54]. Zum physikalischen π^0 bekommt man ein Massensplitting [A]

$$M_{\pi^0}^2 - M_\pi^2 = \frac{16\chi_\delta^2}{F_0^2} L_{87}$$

mit $\chi_\delta = 2B_0(m_d - m_u)$.

Kontinuum

Beschränkt man sich auf das Kontinuum, werden die Ausdrücke für die Pionmasse und die Zerfallskonstante auch in der Form

$$M_\pi^2 = m_\pi^2 + \frac{m_\pi^4}{32\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda_3^2} \right),$$

$$\frac{F_\pi}{F_0} = 1 - \frac{m_\pi^2}{16\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda_4^2} \right)$$

verwendet. Die *universellen Niedrigenergie-Konstanten* Λ_i sind eine Modifizierung der Renormierungsskala Λ ; in Zwei-Flavour-QCD ist

$$\begin{aligned} \Lambda_3 &= \Lambda \cdot \exp(256\pi^2[2L_4 + L_5 - 4L_6 - 2L_8]), \\ \Lambda_4 &= \Lambda \cdot \exp(64\pi^2[2L_4 + L_5]). \end{aligned} \quad (2.11)$$

2.4.6 Strategie

In diesem Kapitel sind konkrete Formeln für viele Observablen in der chiralen Störungstheorie präsentiert worden. Teilweise wurde deutlich, dass das Vorgehen nicht kanonisch ist, d. h. es gibt keinen eindeutigen Rechenweg, um die Formeln der Observablen in der χ PT zu bestimmen. Allerdings hat sich herausgestellt, dass die verschiedenen Herangehensweisen unterschiedlich praktikabel sind. Die von mir angewandte Strategie wird kurz am Beispiel der Pionmasse in NLO erläutert.

Da man sich in der *physical basis* zunächst gut am störungstheoretischen Ansatz $m^2 \gg ma \gg a^2$ ausrichten kann, ist diese Basis ein guter Ausgangspunkt, die Gitterterme Ordnung für Ordnung anzugehen. Sind alle Ordnungen berücksichtigt, kann die Einschränkung auf das spezielle Regime fallengelassen werden. Am Ende erhält man ein Ergebnis, das von den Parametern der Basis abhängt: $M_\pi^2 = M_\pi^2(\chi_0, \rho_0, \rho_3)$.

Die Umrechnung in die *twisted basis* gestaltet sich am einfachsten, wenn man das Ergebnis zunächst in die Form $M_\pi^2 = M_\pi^2(m_\pi^2, \rho_0, \rho_3)$ bringt. Anschließend muss lediglich in den NLO-Termen der Winkel

$$\omega = \omega_0 + \arctan\left(\frac{\rho_3}{\chi_0 + \rho_0}\right)$$

in die *twisted basis* umgerechnet werden. Dies wird durch die Ersetzungen

$$\rho_0 \rightarrow \rho \cos(\hat{\omega}) - \frac{\rho^2}{m_\pi^2} \sin^2(\hat{\omega}), \quad \rho_3^2 \rightarrow \rho^2 \sin^2(\hat{\omega}) \quad (2.12)$$

erreicht. Um das Ergebnis basisunabhängig zu formulieren, kann in NLO ω_0 einfach durch $\hat{\omega} = \omega_0 + \mathcal{O}(\text{NLO})$ ersetzt werden, so dass man schließlich $M_\pi^2 = M_\pi^2(m_\pi^2, \rho, \hat{\omega})$ erhält.

Um den Zusammenhang zu den Observablen und Parametern der Simulation herzustellen, kann in einem optionalen Schritt die Pionmasse in führender Ordnung m_π^2 nach Gl. (2.6) durch die PCAC-Quarkmasse χ_{PCAC} und der Twistwinkel $\hat{\omega}$ mit Gl. (2.5) durch χ'_{PCAC} ersetzt werden. Dann lässt sich $M_\pi^2 = M_\pi^2(\chi_{\text{PCAC}}, \chi'_{\text{PCAC}}, \rho)$ als Funktion der PCAC-Quarkmassen und der Gitterkonstanten formulieren.

2.5 Twisted-Mass-Phasendiagramm

Für die Durchführung und Analyse von Gitter-Simulationen ist es wichtig die grundlegende Phasenstruktur der Theorie zu kennen. Seit der Analyse von S. Aoki [24] ist bekannt, dass es für Wilson-Fermionen zwei Szenarien gibt, wie die kritische Masse erreicht wird. Im *Aoki-Szenario* verschwinden die Pionmassen und Flavour- und Paritäts-Symmetrie sind spontan gebrochen, die Theorie befindet sich in der sog. *Aoki-Phase*. Die Breite dieser Phase Δm ist von Ordnung a^2 . Im zweiten, *normalen Szenario* gibt es einen Phasenübergang erster Ordnung,

bei dem das Quarkkondensat sein Vorzeichen wechselt. Flavour- und Paritäts-Symmetrie sind nicht gebrochen und die Pionmassen sind zwar minimal, aber ungleich null.

Da dieses Phänomen in der Nähe verschwindender physikalischer Quarkmasse auftritt, eignet sich die chirale Störungstheorie hervorragend, um die Phasenstruktur zu untersuchen. Eine solche Analyse von S. R. Sharpe und R. L. Singleton [25] kann diese Phasenstruktur gut reproduzieren. Diese Methode ist auch genutzt worden, um das Phasendiagramm der Twisted-Mass-Gitter-QCD zu untersuchen [26, 27].

2.5.1 χ PT

Die Grundidee dieser Analyse liegt darin, das Potential $V(U)$ der χ PT als Funktion der Feldkonfigurationsmatrix in der Parametrisierung

$$U = u_0 \mathbb{1} + i u_i \tau_i$$

nahe dem chiralen Grenzfall zu untersuchen; insbesondere ist das chirale Kondensat $\langle \bar{q}q \rangle \sim u_0$. Aufgrund der Struktur der Twisted-Mass-Gitter-QCD sind nur u_0 und u_3 relevant und es gilt die Randbedingung $u_0^2 + u_3^2 = 1$. Aus der Bestimmung der Pionmassen und Zerfallskonstante ist das Potential bekannt. In den neu eingeführten Größen lautet es

$$V(U) = -c_1 u_0 + c_2 u_0^2 + c_3 u_3 + c_4 u_3^2 + c_5 u_0 u_3.$$

c_1 und c_3 sind von führender Ordnung und die restlichen Koeffizienten proportional zu Kombinationen der Gasser-Leutwyler-Koeffizienten. Außerdem ist wichtig, in welchen Potenzen Massen und Gitterkonstante in die einzelnen Terme eingehen. Es sind

$$\begin{aligned} c_1 &\sim m' = m + a, \\ c_2 &\sim m'^2 = m^2 + ma + a^2, \\ c_3 &\sim \mu, \\ c_4 &\sim \mu^2, \\ c_5 &\sim \mu m' = \mu(m + a); \end{aligned}$$

damit spielen c_3 , c_4 und c_5 bei reinen Wilson-Fermionen keine Rolle. Man kann nun zwischen drei Regimen unterscheiden.

Im physikalischen Regime $1 \gg m \sim \mu \gg a$ verbleiben nahe dem Kontinuum nur die um die Gitterartefakte reduzierten c_1 - und c_3 -Terme, da die Gitterdiskretisierung und die quadratischen Terme vernachlässigt werden können. In diesem Fall ist der Symmetriebruch wie im Kontinuum. In einem mittleren Regime $1 \gg m \sim \mu \sim a$ wird die Diskretisierung relevant, so dass anstelle von m nun die verschobenen $m' = m + a$ und damit die vollständigen c_1 - und c_3 -Terme betrachtet werden. Auch in diesem Fall verhält sich die Theorie wie im Kontinuum.

In der Region sehr kleiner Quarkmassen $m \sim \mu \sim a^2$ ändert sich die Situation, da nun c_2 wegen des Gitterterms $\sim a^2$ berücksichtigt werden müssen. Da c_4 von Ordnung a^4 und c_5

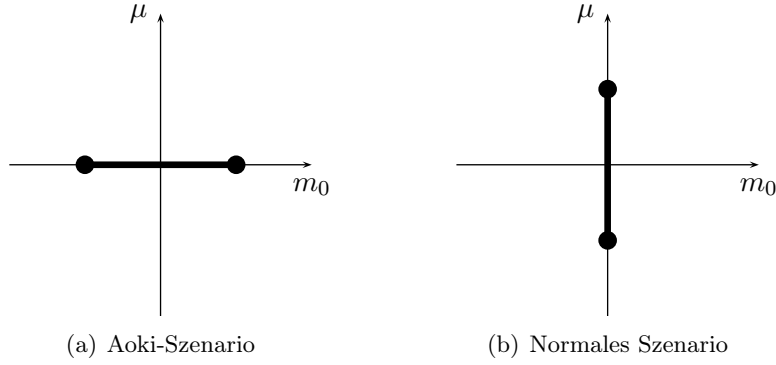


Abb. 2.6: Phasenübergangslinien in beiden Szenarien, die Länge der Linien ist jeweils von Ordnung a^2 .

mindestens von Ordnung a^3 ist, sind diese in der Analyse vernachlässigbar. Für die Klärung der Phasenstruktur muss somit

$$V(U) = -c_1 u_0 + c_2 u_0^2 + c_3 u_3$$

im Grenzfall $m \sim \mu \sim a^2$ betrachtet werden.

Die Analyse zeigt, dass die Phasenstruktur vom (relativen) Vorzeichen von c_2 abhängt. In der einfacheren Situation ohne Twist ist $\mu = 0$ und reproduziert das Ergebnis von Aoki [25]: Für $c_2 > 0$ ändert sich im Minimum u_0 nicht-kontinuierlich bei $|u_0| = 1$, so dass das Aoki-Szenario realisiert ist. Für $c_2 < 0$ liegt das Minimum immer bei $|u_0| = 1$, somit liegt das normale Szenario vor.

Bei endlichem μ verschwindet im Aoki-Szenario der Phasenübergang erster Ordnung [26, 27], d. h. u_0 wechselt bei allen Werten von c_1 das Vorzeichen kontinuierlich und konvergiert gegen ± 1 . Bei $c_2 < 0$ im normalen Szenario ändert sich die Situation ebenfalls. Bei $c_1 = 0$ wechselt u_0 mit $|u_0| < 1$ sein Vorzeichen sprunghaft und ein echter Phasenübergang liegt vor. Auch in diesem Fall bleiben die Pionen massiv. Die Breite dieser Übergangslinie ist $\Delta\mu \sim a^2$. Die Phasenübergangslinien sind in Abb. 2.6 dargestellt.

2.5.2 Simulationsparameter

Für eine Simulation von Twisted-Mass-Gitter-QCD ist die Möglichkeit eines Phasenübergangs relevant. Deswegen wird die mittels der chiralen Störungstheorie gefundene Struktur auf die üblichen Simulationsparameter β, κ, μ übersetzt.

In diesem dreidimensionalen Parameterraum existiert ein β , welches dem Punkt $c_2 = 0$ entspricht. Für kleinere β liegt das Aoki-Szenario vor, bei dem die Phasenübergangslinie in

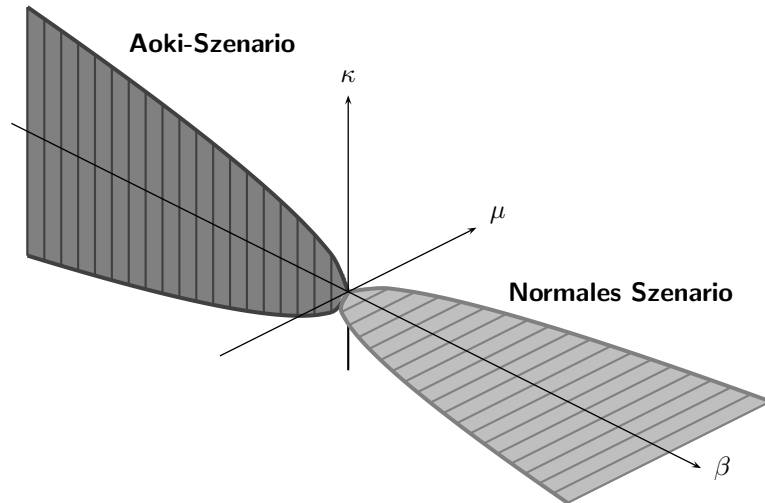


Abb. 2.7: Phasenübergänge des Aoki- und normalen Szenarios im (β, κ, μ) -Raum. Bei vorgegebenem β sind die Linien in den schattierten Flächen die Phasenübergangslinien.

κ -Richtung liegt. Eine solche Beobachtung wurde mit Wilson-Fermionen bei $\beta < 4,6$ gemacht [28]. Im normalen Szenario bei größeren β -Werten liegt die Phasenlinie in μ -Richtung; dieses ist z.B. mit Twisted-Mass-Fermionen bei $\beta = 5,2$ realisiert [29, 30, 31]. Insgesamt ergibt sich daraus das Bild in Abb. 2.7.

2.6 Axialstrom

In diesem Abschnitt werfe ich einen anderen Blick auf die Matrixelemente der Ströme in der chiralen Störungstheorie. Anstatt diese Größen aus der effektiven Wirkung abzuleiten, wird hier ein effektiver Axialstrom aufgestellt, aus dem dann exemplarisch die Pionzerfallskonstante hergeleitet wird.

2.6.1 Effektive Größen

In der Diskussion um das *Symanzik improvement programme* in Abschnitt 1.4 sind in anderem Zusammenhang bereits effektive Größen der Gittertheorie konstruiert worden. Dazu gehören die Wirkung S_{eff} , die Felder $\phi_{\text{eff}}(x)$ und auch Korrelationsfunktionen $\langle \Phi \rangle$.

Betrachtet man in gleicher Vorgehensweise den (lokalen) Axialstrom A_{μ}^a , so führt eine dimen-

sionelle Analyse unter Beachtung der Symmetrien zum *effektiven Strom* [32]

$$A_{\mu,\text{eff}}^a = A_{\mu,\text{QCD}}^a + a\bar{c}_A\partial_\mu[\bar{\psi}\gamma_5 T^a\psi] + \mathcal{O}(a^2),$$

wenn man von einer Reskalierung der Form $1 + \mathcal{O}(am_q)$ absieht. Diesem Axialstrom kann ein passender Gegenterm hinzugefügt werden, der analog zum Sheikholeslami-Wohlert-Term in der Wirkung zu einer $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung führt.

2.6.2 χ PT

Betrachtet man nun diesen Strom $A_{\mu,\text{eff}}^a$ in χ PT, leitet sich daraus nach S. Aoki and O. Bär [32] der Ausdruck

$$A_{\mu,\text{eff},\chi\text{PT}}^a = A_{\mu,\chi\text{PT}}^a \left[1 + \frac{4}{f_0^2}\rho W_{A,1}\langle U + U^\dagger \rangle \right] + 2\rho W_{A,2}\partial_\mu\langle\sigma^a(U - U^\dagger)\rangle \quad (2.13)$$

ab. Dabei wird der oben eingeführte Koeffizient \bar{c}_A in $W_{A,1}$ und $W_{A,2}$ absorbiert. In dieser Form ist der chirale Axialstrom der allgemeinste Ausdruck, der wie ein axialer Strom transformiert. Dieser lokale Strom ist nicht erhalten und muss deswegen einer endlichen Renormierung

$$A_{\mu,\text{ren}}^a = Z_A A_\mu^a.$$

unterzogen werden. Diese kann z. B. durch die Ward-Identität

$$\int_{\partial R} d\sigma_\mu(x)\varepsilon^{abc}\langle f|A_{\mu,\text{ren}}^a(x)A_{\nu,\text{ren}}^b(y)|i\rangle = 2i\langle f|V_{\nu,\text{ren}}^c(y)|i\rangle \quad (2.14)$$

fixiert werden, aus der in Ref. [32]

$$Z_A = 1 - \frac{8}{f_0^2}\rho[2W_{A,1} + W_{A,2} - W_{45}] + \mathcal{O}(a^2) \quad (2.15)$$

abgeleitet wird.

2.6.3 Vergleich

Vergleicht man diesen Ansatz mit dem von Sharpe und Wu [23] müssen die unterschiedlichen Definitionen des Axialstroms berücksichtigt werden. Um Klarheit über die Notation zu geben, sind die verschiedenen Ströme und ihre Bezeichnungen in Tab. 2.1 aufgelistet.

Beschreibung	Variable	benutzt in
beliebiger Axialstrom	A_μ^a	
Axialstrom der Kontinuums-QCD	$A_{\mu,\text{QCD}}^a$	
Axialstrom in Kontinuums- χPT	$A_{\mu,\chi\text{PT}}^a$	
effektiver Axialstrom in χPT , aus den Gittersymmetrien abgeleitet	$A_{\mu,\text{eff},\chi\text{PT}}^a$	[32]
Axialstrom in χPT , aus der chiralen Gitter-Lagrangedichte (Noether-Strom)	$A_{\mu,\text{lat},\chi\text{PT}}^a$	hier, [23]

Tab. 2.1: Bezeichnungen

Noether-Ansatz

Sharpe und Wu konstruieren die Ströme durch die entsprechenden Funktionalableitung der Lagrangedichte, also die Noether-Ströme der Gitterwirkung. Diese effektive chirale Lagrangedichte enthält alle möglichen Terme, die durch die Gittersymmetrien erlaubt sind. Daraus leiten sie ab, dass alle daraus hergeleiteten Ergebnisse für die Observablen ebenfalls alle, wenn auch nicht universellen Gitter-Terme enthalten. Dazu gehören insbesondere auch die Matrixelemente der Ströme für einen beliebig definierten Gitter-Operator.

Zu diesen nicht-universellen Termen gehören z. B. die W_{54} -Terme in den Formeln der Observablen. Wie bereits in Abschnitt 2.3 erläutert, kann der W_{10} mittels einer Redefinition der Felder in diesen absorbiert werden. Obwohl also alle möglichen Terme in den abgeleiteten Größen vorhanden sind, führen unterschiedliche Renormierungsbedingungen i. Allg. zu Ergebnissen, die sich um $\mathcal{O}(a)$ unterscheiden.

Unter expliziter Berücksichtigung von W_{10} leitet man aus der effektiven chiralen Lagrangedichte mittels der Noether-Prozedur den axialen Gitterstrom

$$A_{\mu,\text{lat},\chi\text{PT}}^a = A_{\mu,\chi\text{PT}}^a \left[1 + \frac{4}{f_0^2} \rho W_{45} \langle U + U^\dagger \rangle \right] + \rho W_{10} \partial_\mu \langle \sigma^a (U - U^\dagger) \rangle$$

ab, der die identische Struktur wie $A_{\mu,\text{eff},\chi\text{PT}}^a$ in Gl. (2.13) hat. Ein Vergleich dieser Ausdrücke fixiert

$$W_{A,1} = W_{45}, \quad 2W_{A,2} = W_{10}$$

die Koeffizienten $W_{A,1}$, $W_{A,2}$ an entsprechende Gasser-Leutwyler-Koeffizienten. Die über

$$\langle 0 | A_\mu^a | \pi_b(\vec{p}) \rangle = -f_\pi \langle 0 | \partial_\mu \pi_a | \pi_b(\vec{p}) \rangle = f_\pi \sqrt{Z} (i p_\mu) \delta_{ab}$$

definierte Pion-Zerfallskonstante kann so aus $A_{\mu,\text{lat},\chi\text{PT}}^a$ hergeleitet werden. Man bekommt

$$f_\pi = f_0 \left[1 - \frac{1}{16\pi^2 f_0^2} m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{8}{f_0^2} \chi L_{45} + \frac{8}{f_0^2} \rho (W_{45} + W_{10}/2) \right],$$

wobei die Feldrenormierung

$$\sqrt{Z} = 1 + \frac{8}{f_0^2} \chi L_{45} + \frac{8}{f_0^2} \rho W_{45} + \text{Loop}$$

berücksichtigt werden muss.

Axialstrom-Ansatz

Benutzt man stattdessen den Strom $A_{\mu, \text{eff}, \chi \text{PT}}^a$ von Gl. (2.13), führt dieser zur nicht-renormierten Pion-Zerfallskonstante

$$\sqrt{Z} \sqrt{Z_A} f_\pi = f_0 \left[1 + \frac{8}{f_0^2} [2\chi L_{45} + \rho(2W_{A,1} + W_{A,2})] + \text{Loop} \right].$$

Die Renormierung durch die Feldstärke führt zu

$$\sqrt{Z_A} f_\pi = f_0 \left[1 + \frac{8}{f_0^2} [\chi L_{45} + \rho(2W_{A,1} + W_{A,2} - W_{45})] + \text{Loop} \right].$$

Da der lokale Gitterstrom nicht erhalten ist, erzwingt dieser Ansatz, wie oben erläutert, eine endliche Renormierung mittels Z_A (2.15). Dies führt zum Ergebnis

$$f_\pi = f_0 \left[1 + \frac{8}{f_0^2} \chi L_{45} + \text{Loop} \right],$$

welches mit dem in [23] übereinstimmt, wenn

$$W_{10} = -2W_{45}.$$

Dieses Resultat unterscheidet sich allerdings von der in Ref. [32] zur Illustration des Effekts auf eine Observable angegebenen Formel

$$f_{\pi, \text{eff}, \chi \text{PT}} = f_0 \left[1 - \frac{1}{16\pi^2 f_0^2} [1 + \rho \mathcal{C}_1] m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{8}{f_0^2} m_\pi^2 [L_{45} + \rho \mathcal{C}_2] \right], \quad (2.16)$$

in der $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2$ Linearkombinationen der Niederenergie-Konstanten des Axialstroms sind. Sie können allerdings vernachlässigt werden, da ma für Zerfallskonstanten bereits nächst-nächst-führende Ordnung ist. Dieses Ergebnis stimmt mit dem in [23] überein, wenn

$$W_{10} = -2(W_{45} - L_{45}).$$

Schlussfolgerung

Die W_i - und W'_i -Koeffizienten sind nicht universell und hängen i. Allg. von der Eich- und der Fermionwirkung ab. Wird die Wirkung $\mathcal{O}(a)$ -verbessert, so gilt u. a. $\widetilde{W} = 0$ bzw. $W_{45} = L_{45}$ [33]. Eine $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung des Axialstroms führt dann zusätzlich zu $W_{10} = 0$, so dass

$$f_\pi = f_0 \left[1 - \frac{1}{16\pi^2 f_0^2} m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{8}{f_0^2} m_\pi^2 L_{45} \right].$$

Der Ansatz des effektiven Axialstroms $A_{\mu,\text{eff},\chi\text{PT}}^a$ führt durch die multiplikative Renormierung mittels der Ward-Identität aus Gl. (2.14) zum gleichen Ergebnis, vgl. Gl. (2.16). Für die Pionzerfallskonstante ist diese spezielle Renormierung damit äquivalent zu einer $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung der Wirkung und des Axialstroms.

2.7 „Partially quenched“ χPT

Vor allem in den frühen Simulationen der QCD wurde aufgrund mangelnder Rechenleistung nicht mit der QCD, sondern mit vereinfachten Modellen gerechnet. Eine dieser Vereinfachungen ist das sog. *quenching*. Dabei wird bei der aufwendigen Erzeugung der Feldkonfigurationen die Determinante der dynamischen Fermionmatrix $\det(Q[y, x, U])$ durch eine Konstante ersetzt, so dass lediglich die Eichwirkung verbleibt. Die Bestimmung vieler physikalischer Eigenschaften der Theorie aus den Korrelatoren ist in Bezug auf die Rechenzeit meist deutlich günstiger, so dass in den zugehörigen Propagatoren eine vernünftiger Quarkmasse benutzt wird. Auch wenn dieser Ansatz weit von einer realistischen Simulation entfernt ist, sind die Aussagen solcher Rechnungen in Anbetracht des drastischen Eingriffs einigermaßen gut. Dennoch können aus dieser Theorie keine exakten physikalischen Resultate der QCD extrahiert werden.

Die entscheidende Verbesserung dieser Situation geschieht in der *partially quenched* Theorie. Dieser Ansatz kann im Gegensatz zur voll gequenchten exakte Informationen über die QCD liefern [34]. In der partiell gequenchten Theorie werden zusätzlich Valenzquarks mit realistischen Massen hinzugefügt, die man auch in der Analyse der Korrelatoren verwendet. Anstatt aber die Dynamik der Fermionmatrix vollkommen zu ignorieren, werden dort schwere Seequarks verwendet, da so die benötigte Rechenleistung reduziert wird. Durch diese größeren Seequark-Massen werden die Loop-Beiträge unterdrückt. Zumindest anschaulich kann man sich den Übergang zum vollständig gequenchten Modell so vorstellen, dass die Seequark-Massen unendlich groß sind und damit die Loop-Beiträge völlig vernachlässigt werden.

Diese *partially quenched* Theorie wird in Kapitel 5 in einem unkonventionellen Zusammenhang benutzt, um in der Ein-Flavour-QCD eine künstliche chirale Symmetrie zu konstruieren.

2.7.1 Funktionalintegral

Durch die Einführung der Valenzquarks wird die Anzahl der Freiheitsgrade der Theorie erhöht. Um die Determinante der Valenzquarks in der Fermionmatrix aufzuheben, werden für jedes Valenzquark zusätzlich unphysikalische Geister der Theorie hinzugefügt. Dies wird durch die Betrachtung des Funktionalintegrals deutlich: in der ungequenchten Theorie hat es die Form

$$\int \mathcal{D}A \mathcal{D}[\psi\bar{\psi}] e^{-S_G - \bar{\psi}(\gamma_\mu D_\mu + m)\psi} = \int \mathcal{D}A e^{-S_G} \det(\gamma_\mu D_\mu + m).$$

In der partiell gequenchten Version werden Valenzquarks ψ_V mit Masse m_V eingeführt und das ursprüngliche Quark wird explizit als Seequark ψ_S mit Masse m_S bezeichnet. Für jedes dieser Valenzquarks wird ein kommutierendes Spin-1/2-Teilchen $\tilde{\psi}$ eingeführt. Diese Geister-Teilchen verletzen das Spin-Statistik-Theorem und sind deswegen unphysikalisch. Mit der Notation

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_V \\ \psi_S \end{pmatrix}, \quad \tilde{\psi} = \psi_G \quad \text{und} \quad m = \begin{pmatrix} m_V & 0 \\ 0 & m_S \end{pmatrix}, \quad \tilde{m} = m_G$$

ändert sich das Funktionalintegral zu [35]

$$\int \mathcal{D}A \mathcal{D}[\psi\bar{\psi}] \mathcal{D}[\tilde{\psi}\tilde{\bar{\psi}}] e^{-S_G - \bar{\psi}(\gamma_\mu D_\mu + m)\psi - \tilde{\bar{\psi}}(\gamma_\mu D_\mu + \tilde{m})\tilde{\psi}} = \int \mathcal{D}A e^{-S_G} \frac{\det(\gamma_\mu D_\mu + m)}{\det(\gamma_\mu D_\mu + \tilde{m})}.$$

Wenn die Parameter nun so gewählt werden, dass $m_V = m_G$ ist, dann heben sich die Determinanten für Valenzquarks und Geister gegenseitig auf und tragen insgesamt nicht zur Fermiondeterminante bei.

2.7.2 PQ χ PT Symmetriegruppe

Im Fall von $N = N_f$ Seequarks und zusätzlichen N_V Valenzquarks und Geistern hat diese Theorie eine erweiterte

$$\text{SU}(N + N_V | N_V)_L \times \text{SU}(N + N_V | N_V)_R \quad (2.17)$$

Symmetrie, eine sog. *graduierete* Symmetrie. Diese tritt in der partiell gequenchten chiralen Störungstheorie (PQ χ PT) an Stelle der gewöhnlichen $\text{SU}(N)_L \times \text{SU}(N)_R$ -Symmetrie.

Diese erweiterte Symmetriegruppe wird durch $(N + 2N_V)^2$ hermitesche Generatoren repräsentiert und hat $(2N_V + N)^2 - 1$ Goldstone-Bosonen. Die Feldkomponenten sind durch eine Matrix der Form

$$\Phi(x) = \begin{pmatrix} \phi(x) & \eta_1(x) \\ \eta_2(x) & \tilde{\phi}(x) \end{pmatrix}$$

gegeben. Die Matrizen $\phi(x)$ und $\tilde{\phi}(x)$ haben kommutierende Einträge und beschreiben die $(N_V + N)^2 + N_V^2 - 1$ Goldstone-Bosonen; $\eta_1(x)$ und $\eta_2(x)$ bestehen aus antikommutierenden Grassmann-Elementen. Letztere sind im Rahmen der PQ χ PT physikalisch nicht interessant

und tragen auf Treelevel-Ebene nicht zu den physikalischen Eigenschaften der Goldstone-Bosonen bei. Sie werden deshalb zunächst nicht weiter betrachtet, so dass

$$\Phi_{\text{GB}}(x) = \begin{pmatrix} \phi(x) & 0 \\ 0 & \tilde{\phi}(x) \end{pmatrix}$$

die Felder parametrisiert. Anstatt der Spur wie in der gewöhnlichen χ PT wird hier aufgrund der Gruppenstruktur die Superspur

$$\langle \Phi \rangle = \text{sTr } \Phi \equiv \text{Tr } \phi - \text{Tr } \tilde{\phi}$$

verwendet. Der Übersicht wegen wird außerdem die Notation

$$(a\mathbf{1}; b\mathbf{1}) = \left(\begin{array}{c|c} a\mathbf{1} & 0 \\ \hline 0 & b\mathbf{1} \end{array} \right) = \text{diag}(\underbrace{a, \dots, a}_{N_V+N}, \underbrace{b, \dots, b}_{N_V})$$

benutzt.

2.7.3 Propagator

Die Form der Superspur führt dazu, dass die Felder $\tilde{\phi}(x)$ sowohl kinetische als auch Massenbeiträge mit dem „falschen“ (negativen) Vorzeichen haben [36]. Um die Unterscheidung der Vorzeichen zu verhindern, wird $\tilde{\phi}(x)$ als rein imaginäres Feld eingeführt. Ausgehend von der Feldkonfiguration in der ursprünglichen Basis Φ' mit negativen Vorzeichen, wird dies durch die Transformation

$$\Phi' [(1; -1)p^2 + M'^2] \Phi' = \underbrace{\Phi' (1; -i\mathbf{1})}_{\Phi} [p^2 + \underbrace{(1; +i\mathbf{1})M'^2(1; +i\mathbf{1})}_{M^2}] \underbrace{(1; -i\mathbf{1})\Phi'}_{\Phi}$$

des inversen Propagators und der Felder möglich. Der inverse Propagator bekommt dadurch die gewohnte Form. Die Polstellen des Propagators, d. h. die Nullstellen von $\det(p^2 + M^2)$, ändern sich durch die Transformation nicht, aber die Matrix M^2 bekommt dadurch i. Allg. auch imaginäre Einträge. Die Massen der Goldstone-Bosonen sind wie üblich durch die Polstellen des Propagators festgelegt.

2.7.4 Generatoren der Goldstone-Bosonen

Sind λ_a die Generatoren der $SU(N_V + N)$ und $\tilde{\lambda}_b$ die der $SU(N_V)$, dann lassen sich die Generatoren der Goldstone-Bosonen durch

$$\left(\begin{array}{c|c} \lambda_a & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right), \quad \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & \tilde{\lambda}_b \end{array} \right) \quad \text{und} \quad \lambda_D = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{N_V N(N_V + N)}} \left(\begin{array}{c|c} N_V \cdot \mathbf{1} & 0 \\ \hline 0 & (N_V + N) \cdot \mathbf{1} \end{array} \right)$$

definieren, die die Spurrelationen

$$\langle \lambda_a \lambda_b \rangle = 2\delta_{ab}, \quad \langle \tilde{\lambda}_a \tilde{\lambda}_b \rangle = -2\delta_{ab} \quad \text{und} \quad \langle \lambda_D \lambda_D \rangle = -2$$

erfüllen. Für die Generatoren der Goldstone-Bosonen gilt dann

$$\Phi_{\text{GB}}(x) = \lambda_a \phi_a(x) + \tilde{\lambda}_b \tilde{\phi}_b(x),$$

wobei $\phi_a(x)$ reell und $\tilde{\phi}_b(x)$, $\phi_D(x)$ imaginär sind. Der Einfachheit halber werden die Generatoren und Felder durch

$$\lambda_a = \{\lambda_a, \tilde{\lambda}_b, \lambda_D\} \quad \text{und} \quad \phi_a = \{\phi_a, \tilde{\phi}_b, \phi_D\}$$

zusammengefasst, so dass sich die Felder zu

$$\Phi_{\text{GB}}(x) = \lambda_a \phi_a(x)$$

und die Feldkonfigurationsmatrix zu

$$U(x) = \exp\left(\frac{i}{F_0} \Phi_{\text{GB}}(x)\right)$$

vereinfachen. Des Weiteren wird eine Vorzeichen-Metrik

$$g_{ab} = \text{diag}\left(\underbrace{1, \dots, 1}_{(N_V+N)^2-1}; \underbrace{-1, \dots, -1}_{N_V^2}\right)$$

eingeführt, wodurch sich die Spurrelationen in kompakter Notation zu

$$\langle \lambda_a \lambda_b \rangle = 2g_{ab}$$

vereinfachen. In Analogie zur QCD für $N_f = 2$ und $N_f = 3$ werden die Felder auch mit π , K und η bezeichnet.

2.7.5 Φ_0 als verallgemeinertes η' für PQQCD

In gewöhnlicher χ PT wird das Singulett η' ausintegriert, da es deutlich schwerer als die Goldstone-Bosonen ist und im chiralen Grenzfall eine nicht verschwindende Masse hat. Das funktioniert auch in der PQ χ PT, wobei das η' durch eine verallgemeinerte Variante Φ_0 im gemeinsamen Valenz- und See-Sektor ersetzt wird [36].

Dieses Flavour-Singulett Φ_0 lässt sich in die Theorie einbauen, indem man zunächst die Konfigurationsmatrix um das Singulett erweitert

$$\Phi_{\text{GB}}(x) \longrightarrow \Phi_{\text{GB}}(x) + \Phi_{\eta'}(x),$$

wobei

$$\Phi_{\eta'} = \lambda_{\Phi_0} \Phi_0 \quad \text{mit} \quad \lambda_{\Phi_0} = \sqrt{\frac{2}{N}} \left(\begin{array}{c|c} \mathbb{1} & 0 \\ \hline 0 & \mathbb{1} \end{array} \right).$$

Es gilt $\langle \lambda_{\Phi_0} \lambda_{\Phi_0} \rangle = 2$, so dass dann die Vorzeichen-Metrik zu

$$g_{ab} = \text{diag}(\underbrace{1, \dots, 1}_{(N_V+N)^2-1}; \underbrace{-1, \dots, -1}_{N_V^2}; 1)$$

erweitert wird. Um die Dynamik dieses neuen Feldes zu berücksichtigen, muss die Lagrangedichte um weitere Terme ergänzt werden [36, 37]. Berücksichtigt man lediglich die notwendigen (in den Feldern quadratischen) Terme, so erhält man die Lagrangedichte durch die Ersetzung

$$\mathcal{L} \longrightarrow \mathcal{L} + \frac{\alpha}{2} (\partial_\mu \Phi_0)^2 + \frac{m_{\Phi_0}^2}{2} \Phi_0^2.$$

Um die ursprüngliche PQ χ PT wiederzuerlangen, wird der Massenparameter m_{Φ_0} gegen unendlich laufen gelassen. Dieser Limes ist in den Propagatoren der PQ χ PT wohldefiniert.

2.8 Verallgemeinerte Fits

Bevor es in den folgenden Kapiteln u. a. um die Analyse von Gittersimulationen geht, wird in diesem Abschnitt eine von mir teilweise verwendete, spezielle Fit-Methode erläutert. Diese wird in der Literatur recht selten verwendet und ist eine Verallgemeinerung der „Methode der kleinsten Quadrate“, wenn alle Größen mit einem Fehler behaftet sind.

2.8.1 Verallgemeinerte Methode der kleinsten Quadrate

Methode der kleinsten Quadrate

Die Methode der kleinsten Quadrate wird z. B. in dem einfachen Fall benutzt, um eine Funktion $f(\alpha_p; x)$ mit unbekanntem Parametern α_p , $p = 1 \dots P$ an bestimmte Messgrößen $y_n(x_n)$, $n = 1 \dots N$ anzufitten. Diese Messgrößen sind in der Regel mit y -Fehlern σ_n versehen. Die Lösung des Problems liegt darin, einen Satz von Parametern α_p zu finden, für den die gesamten, mit ihren Fehlern gewichteten (quadratischen) Abweichungen *minimal* werden. Konkret muss die Funktion

$$\chi^2 = \sum_{n=1}^N \left[\frac{f(\alpha_p; x_n) - y_n}{\sigma_n} \right]^2 \tag{2.18}$$

minimiert werden. Bei kleinen Fehlern der Messwerte kann der Fehler der Fitparameter aus der Jacobi-Matrix

$$J_{n,p} = \frac{\partial}{\partial \alpha_p} \frac{f(\alpha_p; x_n)}{\sigma_n}$$

bestimmt werden: es ist dann $\sigma_p^2 = (J^\top J)_{pp}^{-1}$.

Dies ist die *Methode der kleinsten Quadrate*. Die Methode funktioniert allerdings nur, wenn die x_n keine oder nur vernachlässigbare Fehler haben. Dies ist aber bei Fits in der chiralen Störungstheorie nicht immer der Fall.

Verallgemeinerung

Es gibt aber eine sehr elegante Verallgemeinerung dieser Methode, die alle Koordinaten bzw. Messwerte gleich behandelt. Diese Methode beruht in erster Linie auf Ref. [38, 39, 40] und wird häufig bei der Auswertung astronomischer Daten benutzt. Im Folgenden wird die mathematische Beschreibung dieser Verallgemeinerung vorgestellt.

Dazu betrachtet man ein Modell mit insgesamt N Datensätzen, die jeweils aus Q Variablen bestehen. Des Weiteren werden P Parameter benötigt, um diese Daten an M Gleichungen anzufitten. Alle Fitparameter werden im Vektor $\vec{\alpha} = (\alpha_p)_{p=1\dots P}$ zusammengefasst. Zudem werden auch alle Datenpunkte kompakt in einem Vektor

$$\vec{x}^0 = (\vec{x}_n^0)_{n=1\dots N} \in \mathbb{R}^{NQ}$$

zusammengefügt; damit entfällt (zunächst formal) die Unterscheidung in x -Werte und fehlerbehaftete y -Werte. Der entscheidende Unterschied dieser Verallgemeinerung liegt nun darin, dass man die unbekannt, wahren Werte $\vec{x} \in \mathbb{R}^{NQ}$, die dieser Messung zu Grunde liegen, explizit betrachtet. Diese imaginären echten Werte werden mit den Messwerten im Residuum $\vec{v} = \vec{x} - \vec{x}^0$ zusammengefasst. Im Konzept dieser verallgemeinerten Methode rücken die konkreten Messwerte in den Hintergrund, sie werden als eine von unendlich vielen Möglichkeiten betrachtet, die echten Werte zu messen. Der Fokus liegt auf diesen unbekannt, wahren Werten. Ein Schätzer für den gesamten echten Datensatz ist durch

$$\frac{1}{(2\pi)^{NQ/2}} \frac{1}{\sqrt{\det \Sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2} \vec{v}^\top \Sigma \vec{v}\right) \quad (2.19)$$

gegeben, wobei die (Ko)-Varianzen in der Matrix $\Sigma = (\sigma_{ij}^2) \in \mathbb{R}^{NQ \times NQ}$ zusammengefasst sind. Es ist direkt klar, dass dieser Schätzer maximal wird, wenn das (negative) Argument der Exponentialfunktion

$$\frac{1}{2} \vec{v}^\top \Sigma \vec{v} \quad (2.20)$$

minimal wird. In dieser Form wird die Verbindung zur herkömmlichen Methode deutlich: Im Fall $Q = 2$ mit verschwindendem x -Fehler reduziert sich Gl. (2.20) zu $1/2 \chi^2$ aus Gl. (2.18).

Im allgemeinen Fall sucht man das nicht-triviale Minimum, in dem die Fitfunktionen

$$\vec{f} = (\vec{f}_m)_{m=1\dots M} = (f_i)_{i=1\dots MN} \in \mathbb{R}^{MN}$$

als Randbedingungen für die unbekannt, wahren Werte erfüllt sind. Es gibt also einen Datensatz, der durch Fitfunktionen exakt wiedergegeben wird und dessen Datenpunkte unter Berücksichtigung der jeweiligen Fehler minimal von den Messwerten abweicht.

Dieses Problem kann dann so transformiert werden, dass die „Lagrangefunktion“

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \vec{v}^\top \Sigma^{-1} \vec{v} + \vec{\lambda}^\top \vec{f}$$

ohne Randbedingungen minimiert wird. $\vec{\lambda}$ ist der Vektor der *Lagrange-Multiplikatoren*, die für das Ergebnis keine Rolle spielen. Für die Lösung dieses Problems ist es notwendig, dass die Jacobi-Matrizen

$$\begin{aligned} J_{\vec{f}}(\vec{x}) &= (\nabla_{\vec{x}} f_i) \in \mathbb{R}^{MN \times NQ} , \\ J_{\vec{f}}(\vec{\alpha}) &= (\nabla_{\vec{\alpha}} f_i) \in \mathbb{R}^{MN \times P} , \\ J_{\vec{f}}(\vec{\mu}) &= (\nabla_{\vec{\mu}} f_i) \in \mathbb{R}^{MN \times MN} \end{aligned}$$

verschwinden. Als Startwerte einer numerischen Lösung für die unbekannt, echten Werte können einfach die Messwerte selbst benutzt werden, einen Satz von Startparametern von $\vec{\alpha}$ kann man z. B. aus einem vorgeschalteten, gewöhnlichen χ^2 -Fit gewinnen.

Bei kleinen Fehlern der Messwerte kann eine Abschätzung für die Fehler der Parameter α_p aus

$$\sigma_p = \sqrt{\frac{\vec{v}^\top \Sigma^{-1} \vec{v}}{MN - P} \left[J_{\vec{f}}^\top(\vec{\alpha}) W J_{\vec{f}}(\vec{\alpha}) \right]_{pp}^{-1}}$$

bestimmt werden, wobei

$$W = \left[J_{\vec{f}}(\vec{x}) \Sigma J_{\vec{f}}^\top(\vec{x}) \right]^{-1} \in \mathbb{R}^{MN \times MN}$$

die *effektive Gewichtungs-Matrix* ist.

2.8.2 Statistische Fehler

Neben der analytischen Bestimmung der Fehler der abgeleiteten Fitparameter existieren auch statistische Verfahren. Dazu benutzt man nicht nur die Durchschnittswerte und ihre Fehler, sondern viele Samples dieser primären Größen. Auch wenn diese nicht vorliegen, kann man solche auch auf Grundlage der Fehler der Ursprungsgrößen erzeugen. Aus den vielzähligen Fits lässt sich dann der Fehler der Fitparameter bestimmen.

In diesem Zusammenhang ist das sog. *Jackknife-Verfahren* erwähnenswert. Bei dieser Resampling-Methode werden auf Grundlage der Stichprobe (Messwerte) neue Samples generiert, aus denen dann ein Maß für die Veränderlichkeit der abgeleiteten Größe gewonnen wird. Ist

x eine Größe mit den gemessenen Werten x_i , $i = 1 \dots N$, dann werden die sog. *Jackknife-Samples* x^{jack} durch

$$x_j^{\text{jack}} = \frac{1}{N-1} \sum_{i \neq j}^N x_i$$

definiert. Dies ist der Durchschnitt aller Samples bis auf eines. Für abgeleitete Größen $y = f(x)$ ist das entsprechende Jackknife-Sample y^{jack} dann durch

$$y_j^{\text{jack}} = f(x_i^{\text{jack}})$$

gegeben. Der Durchschnitt dieser Größe ist dann

$$\bar{y}^{\text{jack}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j^{\text{jack}}$$

mit einer Varianz von

$$\sigma^2(\bar{y}^{\text{jack}}) = \frac{N-1}{N} \sum_{j=1}^N (y_j^{\text{jack}} - \bar{y}^{\text{jack}})^2.$$

Für den Spezialfall $y(x) = x$ stimmen diese Größen mit dem normalen Mittelwert und der gewöhnlichen Varianz überein.

3 Twisted-Mass-Gitter-QCD mit zwei leichten Quarks

3.1 Simulation

Das Ziel dieser Twisted-Mass-Simulationen ist es, einige wichtige phänomenologische Größen mit dynamischen Quarks bei kleinen, realistischen Quarkmassen zu bestimmen [41, 42, E]. Die Simulationen finden auf verschiedenen Gittern unterschiedlicher Größen statt, bei denen aber stets $a \lesssim 0,1 \text{ fm}$ und die Ausdehnung $L \approx 2 \text{ fm}$ ist. Unter Verwendung der chiralen Störungstheorie und bei Realisierung der automatischen $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung sollen die Ergebnisse ins unendliche Kontinuum und zu physikalischer Quarkmasse extrapoliert werden.

3.1.1 Wirkung

Für das $SU(3)$ -Eichfeld wird die *treelevel improved Symanzik*-Wirkung (tlSym) verwendet; diese ist eine erweiterte Form der Standard-Wilson-Wirkung. Sie gehört zu einer einparametrischen Klasse von Wirkungen, die aus allgemeinen Überlegungen zur Renormierungsgruppe abgeleitet ist. Diese Wirkungen haben neben der (1×1) Wilson-Plaquette zusätzlich rechteckige (1×2) Wilson-Loops, so dass

$$S_G[U] = \beta \sum_x \left[c_0 \sum_{\mu < \nu} \text{Re} \langle 1 - \frac{1}{3} U_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x) \rangle + c_1 \sum_{\mu \neq \nu} \text{Re} \langle 1 - \frac{1}{3} U_{\mu\nu}^{1 \times 2}(x) \rangle \right] \quad (3.1)$$

unter der Normierungsbedingung $c_0 = 1 - 8c_1$; für tlSym ist $c_1 = -1/12$. Die Dynamik der Fermionfelder werden in der *twisted basis* durch die Fermionwirkung aus Gl. (1.2)

$$S_F = \sum_{x,y} \bar{\chi}_f(y) Q[y, x, U] \chi_f(x)$$

beschrieben; in der Wirkung ist nach Gl. (1.6)

$$Q[y, x, U] = [1 + i2\kappa a \mu_0 \gamma_5 \tau_3] \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} \left[\delta_{x+\hat{\mu},y} U_{\mu}(x) [r - \gamma_{\mu}] + \delta_{x-\hat{\mu},y} U_{\mu}(x - \hat{\mu})^{\dagger} [r + \gamma_{\mu}] \right].$$

3.1.2 Maximaler Twist

Wie bereits in Kapitel 1 erläutert, eignet sich die PCAC-Quarkmasse sehr gut, um die Simulationsparameter so einzustellen, dass der Twistwinkel maximal wird und $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung vorliegt. Im Prinzip müsste man nun die kritische Masse für jeden Wert von $a\mu$ bestimmen und zu verschwindendem $a\mu$ extrapolieren. Stattdessen wird der Twistwinkel nur für den kleinsten Wert von $a\mu$ eingestellt. Dies wird dadurch gerechtfertigt, dass bei diesem Wert $a\mu \ll a\Lambda_{\text{QCD}}$ ist und die Auswirkung auf die kritische Masse bei den anderen $a\mu$ somit nur noch einen untergeordneten Effekt hat [43].

Zur Kontrolle wird für die einzelnen Datenpunkt der horizontale Teil der PCAC-Quarkmasse bestimmt. Damit ist vor der Analyse eindeutig, ob (näherungsweise) maximaler Twist vorliegt.

3.2 „Finite Size“-Effekte

Neben den Gitterartefakten, die in der Twisted-Mass-QCD bei maximalem Twist gut kontrollierbar sind, wirkt sich auch die endliche Gitterausdehnung auf die Observablen aus. Um die Resultate in dieser Situation mittels χPT angemessen auswerten zu können, müssen diese *finite-size*-Effekte mit hoher Genauigkeit bekannt sein, um korrekt ins unendliche Volumen zu extrapolieren.

3.2.1 Ansatz von Gasser und Leutwyler

Wie in Kapitel 2 beschrieben, werden in nächstführender Ordnung die Loop-Beiträge z. B. durch dimensionelle Regularisierung divergenter Integrale bestimmt; verallgemeinert sind diese vom Typ

$$\begin{aligned} I_r(m^2) &= \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{(k^2 + m^2)^r} \\ &= \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty ds \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} s^{r-1} e^{-s(k^2+m^2)} \\ &= \frac{1}{\Gamma(r)} \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^\infty ds s^{r-3} e^{-sm^2}. \end{aligned}$$

Der *finite-size*-Effekt tritt auf, weil die Impulse k in einem endlichen Volumen $V = L^3 \times T$ ein diskretes Spektrum haben und aus der Integration eine einfache Summation wird. Der

Ausdruck für dieses Integral wird bei endlicher Ausdehnung zu

$$\begin{aligned} I_r(m^2, L, T) &= \frac{1}{L^3 T} \sum_k \frac{1}{(k^2 + m^2)^r} \\ &= \frac{1}{L^3 T} \int_0^\infty ds \frac{1}{\Gamma(r)} \sum_k s^{r-1} e^{-s(k^2 + m^2)} \end{aligned}$$

mit dem Impulsspektrum $k = 2\pi (n_1/L, n_2/L, n_3/L, n_4/T)$, $n_i \in \mathbb{Z}$. Mit den Hilfsgrößen

$$t_L = \frac{4\pi s}{L^2}, \quad t_T = \frac{4\pi s}{T^2}$$

kann der Bezug zum kontinuierlichen Spektrum hergeleitet werden:

$$\begin{aligned} I_r(m^2, L, T) &= \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty ds s^{r-1} e^{-sm^2} \left[\frac{1}{L} \sum_n e^{-\pi n^2 t_L} \right]^3 \left[\frac{1}{T} \sum_n e^{-\pi n^2 t_T} \right] \\ &= \frac{1}{\Gamma(r)} \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^\infty ds s^{r-3} e^{-sm^2} \left[\sqrt{t_L} \sum_n e^{-\pi n^2 t_L} \right]^3 \left[\sqrt{t_T} \sum_n e^{-\pi n^2 t_T} \right] \\ &\stackrel{(*)}{=} \frac{1}{\Gamma(r)} \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^\infty ds s^{r-3} e^{-sm^2} \left[\sum_n e^{-\pi n^2 / t_L} \right]^3 \left[\sum_n e^{-\pi n^2 / t_T} \right] \\ &= I_r(m^2) + \frac{1}{\Gamma(r)} g_r(m^2, T, L). \end{aligned}$$

Die neu eingeführte Funktion

$$g_r(m^2, T, L) = \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^\infty ds s^{r-3} e^{-sm^2} \sum_{\vec{L} \neq 0} e^{-\frac{\vec{L}^2}{4s}}$$

mit $\vec{L} = (n_1 L, n_2 L, n_3 L, n_4 T)$ quantifiziert gerade die Abweichung vom unendlichen Volumen und beschreibt damit den *finite-size*-Effekt. Die Gültigkeit der Gleichheit (*) beruht auf der Relation

$$\vartheta\left(\frac{-1}{\tau}\right) = \sqrt{\frac{\tau}{i}} \vartheta(\tau) \quad (3.2)$$

des Theta-Nullwerts $\vartheta(\tau) = \vartheta_3(0, \tau)$ mit $\tau = it_L, it_T$; der Theta-Nullwert ist ein Spezialfall der klassischen Jacobi'schen Theta-Funktion

$$\vartheta_3(z, \tau) = \sum_n e^{i(\pi n^2 \tau + 2\pi n z)}.$$

Zwischen den verschiedenen Funktionen $g_r(m^2, T, L)$ besteht der Zusammenhang

$$\frac{\partial}{\partial m^2} g_r(m^2, T, L) = -g_{r+1}(m^2, T, L).$$

In nächstführender Ordnung benötigt man lediglich die Funktion g_1 und bekommt für die Pionmasse und Zerfallskonstante die Korrekturen [44, 45, 46]

$$M_\pi^2(T, L) = M_\pi^2 \left[1 + \frac{1}{2N_f F_0^2} g_1(M_\pi^2, T, L) \right]^2,$$

$$F_\pi(T, L) = F_\pi \left[1 - \frac{N_f}{2F_0^2} g_1(M_\pi^2, T, L) \right].$$

Neben dieser allgemeinen Korrektur sind zwei Grenzfälle von besonderem Interesse.

Der Fall $L \gg T$ ist in der Physik endlicher Temperaturen wichtig. In diesem Zusammenhang wird die inverse Zeit T^{-1} als Temperatur aufgefasst; dort ist also der auftretende Effekt erwünscht. In normaler QCD bei niedrigen Energien muss gerade dieser verhindert werden, so dass in den Simulationen meist $T \gg L$ realisiert wird. In diesem Fall benutzt man in guter Näherung die vereinfachte dimensionslose Funktion

$$\begin{aligned} \tilde{g}_r(mL) &= \frac{(4\pi)^2}{m^{2(2-r)}} g_r(m^2, \infty, L) \\ &= \int_0^\infty ds s^{r-3} e^{-s} \sum_{\tilde{n} \neq 0} e^{-\frac{\tilde{n}^2 (mL)^2}{4s}} \end{aligned}$$

zur Quantifizierung des *finite-size*-Effekts. Mit Hilfe dieser Funktion sind

$$M_\pi^2(L) = M_\pi^2 \left[1 + \frac{1}{2N_f} \xi_\pi \tilde{g}_1(\lambda_\pi) \right]^2, \quad (3.3)$$

$$F_\pi(L) = F_\pi \left[1 - \frac{N_f}{2} \xi_\pi \tilde{g}_1(\lambda_\pi) \right], \quad (3.4)$$

wobei hier die Parameter

$$\xi_\pi = \frac{M_\pi^2}{(4\pi F_\pi)^2}, \quad \lambda_\pi = M_\pi L$$

verwendet werden. $\xi_\pi \ll 1$ tritt in der chiralen Störungstheorie als Entwicklungsparameter auf und λ_π ist das relevante Maß für den Volumeneffekt: je leichter die simulierten Pionen, desto größer muss das Gitter sein. Aufgrund der numerischen Werte von $\tilde{g}_1(\lambda_\pi)$ und dem Gültigkeitsbereich der chiralen Störungstheorie gilt diese Formel i. Allg. für $\lambda_\pi \gtrsim 2$.

Numerische Auswertung

Um die Funktion $\tilde{g}_r(\lambda_\pi)$ numerisch auswerten zu können, kann diese einerseits zu

$$\begin{aligned} \tilde{g}_r(\lambda_\pi) &= \sum_{N=1}^{\infty} m(N) \int_0^\infty ds s^{r-3} e^{-s - \frac{N\lambda_\pi^2}{4s}} \\ &= \sum_{N=1}^{\infty} 2 m(N) \left(\frac{2}{\sqrt{N} \lambda_\pi} \right)^{2-r} K_{2-r}(\sqrt{N} \lambda_\pi) \end{aligned} \quad (3.5)$$

N	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$m(N)$	1	6	12	8	6	24	24	0	12	30

N	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
$m(N)$	24	24	8	24	48	0	6	48	36	24

N	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
$m(N)$	24	48	24	0	24	30	72	32	0	72

Tab. 3.1: Vielfachheiten $m(N)$ für alle $N < 30$. Diese werden für die korrekte Gewichtung an Stelle der \tilde{n}^2 benötigt.

umgeformt werden, wobei $m(N)$ die Vielfachheit des Auftretens von $N = \tilde{n}^2$ ist, siehe Tab. 3.1. Die auftretende *modifizierte Besselfunktion zweiter Art* $K_\alpha(x)$ ist eine Lösung der Differentialgleichung

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} = (x^2 + \alpha^2)y.$$

Für $x \gg |\alpha^2 - \frac{1}{4}|$ fallen alle Funktion dieser Art unabhängig vom Wert von α exponentiell ab:

$$K_\alpha(x) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}.$$

Deswegen konvergiert die Summe in der letzten Zeile von Gl. (3.5) sehr schnell und eignet sich gut zu einer effizienten Auswertung der Funktion.

Anstatt der Verwendung der speziellen Funktion $K_\alpha(x)$ kann man andererseits das Integral in $\tilde{g}_r(\lambda_\pi)$ aber auch durch numerische Integration auswerten. Dazu habe ich den Integranden so umgeformt, dass dieser exponentiell abfällt und somit die Integration über ein endliches Intervall (numerisch) vollkommen ausreicht. Mit Hilfe der Relation (3.2) des Theta-Nullwerts $\vartheta(\tau)$ erhalte ich z. B. die Umformung

$$\begin{aligned} \tilde{g}_r(\lambda_\pi) &= \int_0^\infty ds s^{r-3} e^{-s} \left[\vartheta\left(\frac{i\lambda_\pi^2}{4\pi s}\right) - 1 \right] \\ &= \left(\frac{4\pi}{\lambda_\pi^2}\right)^{r-2} \int_0^\infty ds s^{r-3} \left[\vartheta\left(\frac{i}{s}\right) - 1 \right] e^{-s\lambda_\pi^2/(4\pi)} \\ &= \left(\frac{4\pi}{\lambda_\pi^2}\right)^{r-2} \int_1^\infty ds \left\{ s^{r-\frac{3}{2}} \left[\vartheta(is) - s^{-\frac{3}{2}} \right] \underbrace{e^{-s\lambda_\pi^2/(4\pi)}}_{\exp_0} + s^{1-r} \left[\vartheta(is) - 1 \right] \underbrace{e^{-\lambda_\pi^2/(4\pi s)}}_{\exp_0} \right\}. \end{aligned}$$

Die so zusammengesetzte Funktion konvergiert nun sehr schnell, wenn $s \rightarrow \infty$, so dass sich $\tilde{g}_r(\lambda_\pi)$ in dieser Integraldarstellung in den von mir verwendeten Fit-Algorithmen mit geringer Rechenzeit sehr präzise bestimmen lässt.

3.2.2 Lüscher-Ansatz

Ein vollständig anderer Ansatz wurde von M. Lüscher ausgearbeitet [47]. Dieser basiert auf der Erkenntnis, dass die Auswirkung eines endlichen Volumens L^3 auf einige physikalische Größen mit bestimmten Matrixelementen im unendlichen Volumen verknüpft ist. Insbesondere kann die Massenveränderung mit der $\pi\pi$ Streuamplitude \mathcal{F}_π in Beziehung gesetzt werden und die Änderung der Zerfallskonstante mit \mathcal{N}_π , welches aus dem Matrixelement $\langle \pi\pi | A_\mu | \pi \rangle$ abgeleitet wird. Die Relationen lauten

$$\begin{aligned} M_\pi(L) - M_\pi &= -\frac{3}{16\pi^2\lambda_\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \mathcal{F}_\pi(iy) e^{-\sqrt{M_\pi^2+y^2}\lambda_\pi} + \mathcal{O}(e^{-\bar{M}L}), \\ F_\pi(L) - F_\pi &= +\frac{3}{8\pi^2\lambda_\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \mathcal{N}_\pi(is) e^{-\sqrt{M_\pi^2+y^2}\lambda_\pi} + \mathcal{O}(e^{-\bar{M}L}), \end{aligned}$$

wobei \bar{M} eine generische Grenze darstellt. Man kann zeigen, dass in einer Theorie, die ausschließlich Goldstone-Bosonen enthält, diese Grenze bei $\bar{M} = \sqrt{2}M_\pi$ liegt. Es existieren auch ähnliche Formeln für andere pseudoskalare Bosonen.

Eine grundsätzliche Einschränkung dieses Ansatzes ist, dass er nur für die ungequenchte Theorie gültig ist, da er die Unitarität der Theorie voraussetzt, was in der (partiell) gequenchten nicht der Fall ist.

Störungstheoretische Behandlung

Auf Grundlage der Ausdrücke in Zwei-Flavour- χ PT für die Matrixelemente in führender Ordnung im unendlichen Volumen

$$\mathcal{F}_\pi^{(2)}(is) = -\frac{M_\pi^2}{F_\pi^2}, \quad \mathcal{N}_\pi^{(2)}(is) = -2\frac{M_\pi}{F_\pi} \quad (3.6)$$

bekommt man mit der obigen Relation die Verschiebungen

$$\begin{aligned} M_\pi(L) - M_\pi &= +\frac{3}{8\pi^2} \frac{M_\pi^2}{F_\pi^2 L} K_1(\lambda_\pi) + \mathcal{O}(e^{-\bar{M}L}), \\ F_\pi(L) - F_\pi &= -\frac{3}{2\pi^2} \frac{M_\pi}{F_\pi L} K_1(\lambda_\pi) + \mathcal{O}(e^{-\bar{M}L}). \end{aligned}$$

Diese entsprechen gerade dem Ergebnis nach Gasser und Leutwyler in den Gln. (3.3) und (3.4), wenn man in der Entwicklung von \tilde{g}_1 nach den modifizierten Besselfunktionen nur den ersten Summanden aus Gl. (3.5) mitnimmt. Damit reicht diese Approximation nicht aus, um die *finite-size*-Effekte angemessen zu quantifizieren.

Der wesentliche Vorteil dieser Methode ist, dass es durch Anwendung der chiralen Störungstheorie auf \mathcal{F}_π und \mathcal{N}_π prinzipiell möglich ist, beliebig hohe Ordnungen der *finite-size*-Effekte zu berücksichtigen.

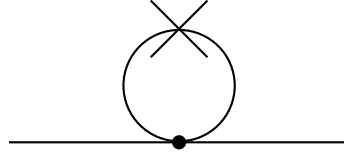


Abb. 3.1: Ein-Loop-Diagramm mit Vierer-Vertex, bei dem im Loop die *wrappings* berücksichtigt sind.

3.2.3 Verallgemeinerung des Lüscher-Ansatzes

Die Verbindung der Vorzüge des Lüscher-Ansatzes und der vollen Entwicklung von \tilde{g}_1 bei Gasser und Leutwyler wurde von Colangelo, Dürr und Haefeli (CDH) gezeigt [48, 49, 50, 51]. Die Herleitung folgt denselben Schritte wie bei Lüscher, aber mit der zusätzlichen Berücksichtigung der exponentiell stärker unterdrückten Terme. Dies führt zu einer Aufsummierung von verschieden stark gedämpften Beiträgen. Das vollständige Ergebnis lautet

$$M_\pi(L) - M_\pi = -\frac{M_\pi}{32\pi^2\lambda_\pi} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{m(N)}{\sqrt{N}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \mathcal{F}_\pi(is) e^{-\sqrt{N(1+s^2)}\lambda_\pi} + \mathcal{O}(e^{-\bar{M}L}),$$

$$F_\pi(L) - F_\pi = +\frac{M_\pi}{16\pi^2\lambda_\pi} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{m(N)}{\sqrt{N}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \mathcal{N}_\pi(is) e^{-\sqrt{N(1+s^2)}\lambda_\pi} + \mathcal{O}(e^{-\bar{M}L}),$$

wobei die Aufsummierung wie in Gl. (3.5) erfolgt. Zur Vereinfachung wurde außerdem die Substitution $s = y/M_\pi$ durchgeführt. Für die vollständige Summe gilt die Relation $\bar{M} > \sqrt{3}M_\pi$, was bedeutet, dass mindestens alle Terme bis einschließlich Ordnung $e^{-\sqrt{3}\lambda_\pi}$ berücksichtigt sind. Der Einschränkung von \bar{M} liegt zu Grunde, dass alle (exponentiell unterdrückten) Beiträge von Zwei-Loop und höher nicht berücksichtigt sind.

Behandlung in χ PT

Auf Grundlage der Ausdrücke in Zwei-Flavour- χ PT für die Matrixelemente in führender Ordnung aus Gl. (3.6) bekommt man unter Verwendung der Integral-Darstellung

$$B^{2k}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} ds s^{2k} e^{-\sqrt{(1+s^2)}x} = \frac{\Gamma(k + \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2})} \left(\frac{2}{x}\right)^k K_{k+1}(x)$$

das volle Ein-Loop-Ergebnis von Gasser und Leutwyler. Das bedeutet insbesondere, dass alle Selbstenergie-Korrekturen einbezogen sind, die aus Pion austauschen um das endliche Volumen resultieren. In Feynman-Diagrammen werden diese Umwicklungen oder *wrappings* meist durch gekreuzte Loops gekennzeichnet. Als Beispiel ist in Abb. 3.1 das Ein-Loop-Diagramm mit Vierer-Vertex abgebildet.

Besonders interessant ist, dass die Matrixelemente in führender Ordnung die Korrekturen in NLO liefern; dies wird auch als *elevator effect* bezeichnet. Gerade die Bestimmung von Effekten höherer Ordnung ist dadurch deutlich vereinfacht. Dies ist eine wichtige Eigenschaft, weil gerade bei kleinen Quarkmassen die numerische Analyse zeigt, dass auch höhere Ordnungen der *finite-size*-Effekte berücksichtigt werden müssen, um eine angemessene Genauigkeit zu gewährleisten.

Die Matrixelemente $\mathcal{F}_\pi(is)$ und $\mathcal{N}_\pi(is)$ haben in χ PT die allgemeinen Entwicklungen

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_\pi(is) &= \mathcal{F}_\pi^{(2)}(is) + \xi_\pi \mathcal{F}_\pi^{(4)}(is) + \xi_\pi^2 \mathcal{F}_\pi^{(6)}(is) + \dots, \\ \mathcal{N}_\pi(is) &= \mathcal{N}_\pi^{(2)}(is) + \xi_\pi \mathcal{N}_\pi^{(4)}(is) + \xi_\pi^2 \mathcal{N}_\pi^{(6)}(is) + \dots\end{aligned}$$

Diese spiegeln sich in den aufintegrierten Ausdrücken für Masse und Zerfallskonstante

$$\begin{aligned}M_\pi(L) - M_\pi &= -\frac{M_\pi \xi_\pi}{2\lambda_\pi} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{m(N)}{\sqrt{N}} \left[I_{M_\pi}^{(2)} + \xi_\pi I_{M_\pi}^{(4)} + \xi_\pi^2 I_{M_\pi}^{(6)} + \mathcal{O}(\xi_\pi^3) \right], \\ F_\pi(L) - F_\pi &= +\frac{F_\pi \xi_\pi}{\lambda_\pi} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{m(N)}{\sqrt{N}} \left[I_{F_\pi}^{(2)} + \xi_\pi I_{F_\pi}^{(4)} + \xi_\pi^2 I_{F_\pi}^{(6)} + \mathcal{O}(\xi_\pi^3) \right],\end{aligned}$$

in den $I^{(2k)}$ wider. Die einzelnen Terme werden durch

$$\begin{aligned}I_{M_\pi}^{(2k)}(\sqrt{N}\lambda_\pi) &= \int_{-\infty}^{\infty} ds \mathcal{F}_\pi^{(2k)}(is) e^{-\sqrt{N(1+s^2)}\lambda_\pi}, \\ I_{F_\pi}^{(2k)}(\sqrt{N}\lambda_\pi) &= \int_{-\infty}^{\infty} ds \mathcal{N}_\pi^{(2k)}(is) e^{-\sqrt{N(1+s^2)}\lambda_\pi}\end{aligned}$$

aus der chiralen Entwicklung der Matrixelemente berechnet. Nach Gl. (3.6) ist z. B. in führender Ordnung in Übereinstimmung mit Gl. (3.5)

$$I_{M_\pi}^{(2)}(x) = -B^0(x), \quad I_{F_\pi}^{(2)}(x) = -2B^0(x).$$

NLO

In NLO Ausdrücken für die Matrixelemente sind einerseits Polynome enthalten, die i. Allg. zu Beiträgen der Form $B^{2k}(x)$ führen, aber auch weitere Terme $S_{M_\pi}^{(4)}$ bzw. $S_{F_\pi}^{(4)}$. Insgesamt findet man

$$\begin{aligned}I_{M_\pi}^{(4)}(x) &= -\frac{1}{18} [55 - 72\bar{l}_1 - 48\bar{l}_2 + 45\bar{l}_3 + 36\bar{l}_4] B^0(x) + \frac{8}{9} [14 - 3\bar{l}_1 - 12\bar{l}_2] B^2(x) + S_{M_\pi}^{(4)}(x), \\ I_{F_\pi}^{(4)}(x) &= -\frac{1}{18} [14 - 36\bar{l}_1 - 24\bar{l}_2 + 54\bar{l}_4] B^0(x) + \frac{8}{9} [14 - 3\bar{l}_1 - 12\bar{l}_2] B^2(x) + S_{F_\pi}^{(4)}(x),\end{aligned}$$

wobei hier die Koeffizienten

$$\bar{l}_i = 2 \ln \left(\frac{\Lambda_i}{M_\pi} \right) = \bar{l}_i^{\text{phys}} + 2 \ln \left(\frac{m_\pi^{\text{phys}}}{M_\pi} \right)$$

logarithmisch von der Pionmasse M_π abhängen. Die numerischen Werte der \bar{l}_i^{phys} sind in Tab. 3.3 auf S. 58 aufgeführt.

Die zusätzlichen $S^{(4)}$ -Beiträge sind Integrale und setzen sich im Integranden u. a. aus der Funktion

$$g(2 + 2is) = \sigma \log \left(\frac{\sigma - 1}{\sigma + 1} \right) + 2, \quad \sigma = \sqrt{1 - \frac{4}{2 + 2is}}$$

und ihrer Ableitung g' zusammen. Die daraus resultierenden Integrale $S_{M_\pi}^{(4)}$, $S_{F_\pi}^{(4)}$ können analytisch nicht aufgelöst werden; konkret lauten sie

$$\begin{aligned} S_{M_\pi}^{(4)}(x) &= \frac{1}{3} [13R_0^0(x) - 16R_0^1(x) - 40R_0^2(x)], \\ S_{F_\pi}^{(4)}(x) &= \frac{4}{3} [R_0^0(x) - R_0^1(x) - 10R_2^0(x)] - \frac{1}{6} [13R_0^{0'}(x) - 16R_0^{1'}(x) - 40R_0^{2'}(x)]. \end{aligned}$$

Die einzelnen Elemente sind über

$$R_0^{k(l)}(\sqrt{N}\lambda_\pi) = \begin{cases} \text{Re} & \int_{-\infty}^{\infty} ds s^{2k} g^{(l)}(2 + 2is) e^{-\sqrt{N(1+s^2)}\lambda_\pi} \\ \text{Im} & \int_{-\infty}^{\infty} ds s^{2k} g^{(l)}(2 + 2is) e^{-\sqrt{N(1+s^2)}\lambda_\pi} \end{cases} \quad \text{für } \begin{cases} k \text{ gerade,} \\ k \text{ ungerade} \end{cases}$$

definiert. Glücklicherweise sind die Beiträge zu den Korrekturen nur in der Größenordnung von wenigen Prozenten, so dass eine numerische Näherung absolut ausreichend ist.

Um $S_{M_\pi}^{(4)}$ und $S_{F_\pi}^{(4)}$ numerisch zu bestimmen, approximieren Colangelo, Dürr und Haefeli die Funktion

$$\begin{aligned} g(2 + 2is) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2i)^l}{l!} g_l s^l \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-2)^l}{l!} g_{2l} s^{2l} + 2i \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-2)^l}{l!(2l+1)} g_{2l+1} s^{2l+1} \end{aligned}$$

und

$$g'(2 + 2is) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2i)^l}{l!} g_{l+1} s^l$$

durch Polynome, welche dann wiederum Beiträge vom Typ $B^{2k}(x)$ liefern. Sie führen an, dass bereits ein Polynom zweiter Ordnung die Amplituden im Intervall $s \in [-1, 1]$ einigermaßen vernünftiger wiedergibt. Außerhalb dieses Bereiches spielt die Abweichung keine Rolle, weil die Approximation dort exponentiell unterdrückt wird. Allerdings gibt es einen Zwischenbereich oberhalb von $s = 1$, in dem die exponentielle Unterdrückung noch nicht ausreicht und die Approximation vor allem bei den $R_0^{k'}$ unzureichend ist. Diese Situation wird bei Berücksichtigung höherer Polynomordnungen noch schlechter. Die Approximation durch ein Polynom zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} S_{M_\pi}^{(4)}(x) &= \frac{13}{3} g_0 B^0(x) - \frac{2}{3} [20g_0 + 16g_1 + 13g_2] B^2(x) + \mathcal{O}(B^4(x)), \\ S_{F_\pi}^{(4)}(x) &= \frac{1}{3} [8g_0 - 13g_1] B^0(x) - \frac{1}{3} [40g_0 - 12g_1 - 8g_2 - 13g_3] B^2(x) + \mathcal{O}(B^4(x)) \end{aligned}$$

Fehler \mathcal{O}	$\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}(2)$	$\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}(3)$	$\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}(4)$	$\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}(5)$	$\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}(2)$	$\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}(3)$	$\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}(4)$	$\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}(5)$
B^2	11,68	1,74	0,35	0,08	-3,88	-0,58	-0,11	-0,03
B^4	-30,82	-2,28	-0,24	-0,03	8,65	0,61	0,06	0,00
B^6	23,59	0,58	0,05	0,01	-18,37	-0,82	-0,08	-0,02
B^8	-142,57	-3,86	-0,23	-0,01	148,66	3,65	0,20	0,01
⋮								
Fit	-7,99	-0,74	-0,07	-0,01	-4,54	-0,90	-0,18	-0,04
numerisch	-7,99	-0,74	-0,06	0,01	-4,48	-0,86	-0,16	-0,03

Tab. 3.2: Numerische Werte von $\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}$ und $\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}$ für $\lambda_\pi = 2, 3, 4, 5$ in verschiedenen Approximationen sowie die der gefitteten und der exakten Funktionen.

ist zumindest bei den Massen die günstigste in dieser asymptotischen Entwicklung (vgl. Tab. 3.2). Dort sind die Werte von

$$\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}(\lambda) = \sum_N \frac{4m(N)}{\sqrt{N}\lambda} \mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}(\sqrt{N}\lambda),$$

$$\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}(\lambda) = \sum_N \frac{4m(N)}{\sqrt{N}\lambda} \mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}(\sqrt{N}\lambda)$$

für verschiedene Volumina aufgeführt. Die Schwankungen zwischen den Polynomordnungen sind sehr stark und bei der Berücksichtigung höherer Ordnungen fluktuieren die Werte immer stärker.

Da die Formeln nur für Werte $\lambda_\pi \gtrsim 2$ gültig und $\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}$, $\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}$ für $\lambda_\pi \gtrsim 5$ numerisch irrelevant sind, habe ich als Alternative auch einen rein numerischen Ansatz gewählt: Man kann z. B. im Intervall $[2, 6]$ 17 Volumina im gleichen Abstand 0,25 nehmen, die genauen Werte der $\mathcal{S}^{(4)}$ numerisch bestimmen und anschließend durch einen Fit die eigentlichen Funktionen approximieren. Bereits ein einfacher exponentieller Fit liefert mir

$$\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}(\lambda) \approx -e^{6,851-2,386\lambda}$$

$$\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}(\lambda) \approx -e^{4,758-1,622\lambda} \quad \text{für } \lambda \in [2, 6].$$

In diesem Bereich sind die Fehler sehr gering, wie man Tab. 3.2 entnehmen kann.

Da die Werte der Fit-Funktionen die exakten Werte deutlich besser wiedergeben als die der polynomialen Approximation von CDH, verwende ich im Folgenden die Fit-Funktionen zur Berechnung von $\mathcal{S}_{M_\pi}^{(4)}$ und $\mathcal{S}_{F_\pi}^{(4)}$.

3.3 Störungstheoretische Analyse

3.3.1 Fit-Parameter

Bei der wirklichen Anzahl der Fit-Parameter muss berücksichtigt werden, dass sich die renormierten Größen von den teilweise unrenormierten Gittergrößen durch die multiplikativen Renormierungskonstanten Z_A , Z_P usw. unterscheiden. In LO hat man für Pionmasse, Zerfallskonstante und die PCAC-Quarkmasse bei maximalem Twist die unabhängigen Fit-Parameter

$$\{a2B, aF_0\}$$

mit $B = B_0/Z_P$; bei beliebigem Twistwinkel hat man zusätzlich noch Z_A , da m_χ^{PCAC} und μ_0 unterschiedlich renormiert werden, siehe Gl. (1.11) auf S. 13.

Anstatt in Einheiten der Gittergröße a betrachtet man die physikalischen Observablen und die Fitparameter oft auch in Einheiten der Sommer-Skala r_0 . Das Verhältnis r_0/a wird in der Regel dann in jedem Punkt gemessen und die Observablen lassen sich dann durch das jeweilige r_0/a direkt umrechnen. In den Fits der chiralen Störungstheorie kann man diese Werte aber so nicht benutzen, da die analytische Abhängigkeit des Verhältnisses r_0/a von der Quarkmasse unbekannt ist. Um jegliche Massenabhängigkeit zu vermeiden, extrapoliert man deswegen die verschiedenen r_0/a in den chiralen Limes und benutzt dieses globale

$$\left. \frac{r_0}{a} \right|_{\text{chiral}},$$

um in die Gittergrößen zur r_0 -Skala umzurechnen. Das extrapolierte r_0/a kann dann als weiterer Fitparameter aufgefasst werden.

In nächstführender Ordnung kommen außerdem Kombinationen der Gasser-Leutwyler-Koeffizienten zum Tragen. Vernachlässigt man Effekte der Ordnung a^2 , bekommt man bei maximalem Twist lediglich zwei weitere Kombinationen, so dass insgesamt die Parameter

$$\{a2B_0Z_P^{-1}, aF_0, \ln(a^2\Lambda_3^2), \ln(a^2\Lambda_4^2)\}$$

einzubeziehen sind. Es ist aber auch üblich, die beiden zusätzlichen Koeffizienten in der Form Λ_i/F_0 , also unabhängig vom Gitterabstand a zu bestimmen.

Bei simultanen Fits von verschiedenen β -Werten muss man auch die unterschiedlichen Gitterkonstanten a_i berücksichtigen. Dies führt zu einem zusätzlichen Fit-Parameter je zusätzlichem β -Wert, z. B. deren Verhältnis $\alpha_i = a_i/a_{i+1}$. Außerdem ist die Renormierung durch Z_P leicht von β abhängig, so dass man prinzipiell nun auch verschiedene Z_P berücksichtigen muss.

Des Weiteren ist es aber z. B. auch möglich, den physikalischen Punkt für die Quarkmassen im Fit zu bestimmen. Meine Methode diesen Punkt festzulegen, ist die Forderung, dass dort

\bar{l}_1	\bar{l}_2	\bar{l}_3	\bar{l}_4
$-0,4 \pm 0,6$	$4,3 \pm 0,1$	$2,9 \pm 2,4$	$4,4 \pm 0,2$

Tab. 3.3: Phänomenologische Schätzungen von l_i , $i = 1, \dots, 4$.

das physikalische Verhältnis

$$\frac{aM_\pi}{aF_\pi} = \frac{m_\pi^{\text{phys}}}{f_\pi^{\text{phys}}} \approx \frac{135,0 \text{ MeV}}{130,7 \text{ MeV}} \approx 1,033$$

für das neutrale Pion vorliegt; durch diese Festlegung ist mit den zwei Bezugsgrößen auch der Gitterabstand a bekannt. Mit dieser Herangehensweise lassen sich auch die Größen

$$\bar{l}_i^{\text{phys}} = 2 \ln \left(\frac{\Lambda_i}{m_\pi^{\text{phys}}} \right) = \bar{l}_i(M_\pi) + 2 \ln \left(\frac{M_\pi}{m_\pi^{\text{phys}}} \right)$$

definieren, wobei in der Literatur oft auch die Schreibweise $\bar{l}_i = \bar{l}_i(m_\pi^{\text{phys}}) = \bar{l}_i^{\text{phys}}$ verwendet wird. Die phänomenologischen Werte sind in Tab. 3.3 aufgelistet. In diesem Fall hat man bei mehreren β -Werten die Fit-Parameter

$$\{B_0, F_0, \bar{l}_3^{\text{phys}}, \bar{l}_4^{\text{phys}}\} + \{a, Z_P\}_\beta.$$

Berücksichtigt man auch noch *finite-size*-Effekte in höherer Ordnung, wie in Abschnitt 3.2 erläutert, müssen auch die Fitparameter

$$\{\bar{l}_1, \bar{l}_2\}$$

berücksichtigt werden. Diese sind aber in der Regel aufgrund der Datenlage nicht ohne Weiteres zu fitten. Stattdessen kann man sich aber die phänomenologischen Werte samt ihrer geschätzten Fehler als (Bayes'schen) Ansatz für den Wert wählen und die zugehörigen Summanden

$$\left[\frac{\bar{l}_i^{\text{phys}} - \bar{l}_i^{\text{fit}}}{\Delta \bar{l}_i^{\text{phys}}} \right]^2, \quad i = 1, 2$$

im χ^2 der Methode der kleinsten Quadrate hinzufügen. So kann man auch mit Z_P verfahren, wenn man diese Konstante mit ihrem Fehler bestimmt hat.

3.3.2 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden meine Ergebnisse von Fits mit den gerade beschriebenen Parametern und den im Abschnitt 3.2 erläuterten *finite-size*-Effekten nach CDH präsentiert.

Die für die chirale Störungstheorie für Mesonen relevanten Daten sind in Tab. 3.4 aufgelistet [41, 42, E]. Für den Gitterpunkt $\beta = 3,80$ sind vier Datenpunkte angegeben, bei denen A_1

$\beta = 3.80$						
	$a\mu$	am_π	af_π	am'_{PCAC}	r_0/a	L/a
A_1	0,0060	0,18518(87)	0,07702(75)	0,00190(40)	4,365(20)	24
A_2	0,0080	0,20830(80)	0,08360(54)	0,00054(38)	4,490(49)	24
A_3	0,0110	0,24240(47)	0,08922(25)	-0,0002(5)	4,361(21)	24
A_4	0,0165	0,29570(51)	0,09691(22)	-0,0017(2)	4,270(20)	24

$\beta = 3.90$						
	$a\mu$	am_π	af_π	am'_{PCAC}	r_0/a	L/a
B_1	0,0040	0,13623(65)	0,06459(37)	0,00017(17)	5,196(28)	24
B_2	0,0064	0,16937(36)	0,07051(35)	-0,00009(17)	5,216(27)	24
B_3	0,0085	0,19403(50)	0,07420(24)	-0,00052(17)	5,130(28)	24
B_4	0,0100	0,21004(52)	0,07591(40)	-0,00097(26)	5,143(25)	24
B_5	0,0150	0,25864(70)	0,08307(34)	-0,00145(42)	5,038(24)	24
B_6	0,0040	0,13377(24)	0,06625(16)	0,00022(11)	-	32
B_7	0,0030	0,11668(39)	0,06328(31)	-0,00030(14)	-	32

$\beta = 4.05$						
	$a\mu$	am_π	af_π	am'_{PCAC}	r_0/a	L/a
C_1	0,003	0,1038(6)	0,0500(4)	0,00036(14)	6,584(34)	32
C_2	0,006	0,1432(6)	0,0569(2)	-0,00004(14)	6,509(38)	32
C_3	0,008	0,1651(5)	0,0595(2)	-0,00065(13)	6,494(36)	32
C_4	0,012	0,2025(6)	0,0644(2)	-0,00092(14)	6,284(22)	32
C_5	0,006	0,1448(11)	0,05584(45)	-0,00027(19)	6,494(36)	24
C_6	0,006	0,1520(15)	0,05081(54)	-0,00002(20)	6,284(22)	20
C_7	0,003	0,1209(20)	0,0369(15)	-0,00008(38)	6,284(22)	20

Tab. 3.4: Der betrachtete Satz an Messwerten der ETM Kollaboration. Für $\beta = 3,80$ wird die Renormierung $Z_P = 0,405(9)$, bei $\beta = 3,90$ mit $Z_P = 0,454(6)$ und bei $\beta = 4,05$ mit $Z_P = 0,477(9)$ jeweils bei 2 GeV im $\overline{\text{MS}}$ -Schema bestimmt.

	$B_{1,2,3,4}$	$B_{1,2,3,4,6}$	$B_{1,2,3,4,6,7}$	$B_{1,2,3,6,7}$
$a[\text{fm}]$	0,0877(12)	0,0889(7)	0,0887(7)	0,0885(7)
\bar{l}_1	-0,40(60)	-0,54(60)	-0,54(60)	-0,52(60)
\bar{l}_2	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)
\bar{l}_3	3,68(12)	3,39(8)	3,38(7)	3,28(10)
\bar{l}_4	4,63(7)	4,60(5)	4,61(4)	4,64(5)
$f_0[\text{MeV}]$	121,26(67)	121,33(66)	121,30(66)	121,25(66)
$B[\text{GeV}]$	2,647(70)	2,529(45)	2,532(43)	2,521(45)
χ^2/dof	0,18	1,53	1,25	1,26

Tab. 3.5: Auswahl an Ergebnissen für Fits bei $\beta = 3,90$. In Spalte eins sind zu wenige Datenpunkte, um vertrauenswürdige Ergebnisse zu bekommen. Insgesamt stimmen die unterschiedlichen Ergebnisse gut miteinander überein.

deutlich vom maximalen Twist abweicht und deswegen in der Analyse nicht berücksichtigt wird. Beim Datenpunkt A_4 ist wegen der großen Pionmasse die Gültigkeit der χPT zu bezweifeln, so dass für dieses β insgesamt zu wenige vertrauenswürdige Daten vorliegen, um sinnvolle Einzelfits durchzuführen.

Einzelfit $\beta = 3.90$

Für die Datenpunkte bei $\beta = 3,90$ sind insgesamt sieben Datensätze aufgeführt. Die Punkte B_1 bis B_4 liegen bei maximalem Twist und haben relativ kleine Quarkmassen. Der Punkt B_6 gehört ebenfalls in diese Kategorie, hat aber eine andere Gitterausdehnung $L/a = 32$ im Gegensatz zu $L/a = 24$ bei B_1 bis B_5 . Durch die Hinzunahme dieses Punktes können die *finite-size*-Effekte besser bestimmt werden, weil dann auch die Skalierung zwischen verschiedenen Volumina berücksichtigt wird. Der letzte aufgeführte Punkt B_7 weicht leicht vom maximalen Twist ab.

In Tab. 3.5 sind die Ergebnisse von vier dieser Fits aufgeführt. Die Güte der Ergebnisse in der ersten Spalte ist extrem hoch, was letztendlich auf die geringe Anzahl der Freiheitsgrade zurückzuführen ist. Dies erklärt auch die leicht größeren statistischen Fehler. In den anderen drei Datensätzen wird mindestens ein Punkt mit einem anderen Volumen einbezogen, so dass diese Ergebnisse realistischer sind, weil die *finite-size*-Effekte deutlich besser erfasst werden.

Besonders hervorzuheben ist dabei das Ergebnis in der dritten Spalte: Die Güte des Fits ist ziemlich hoch und es werden insgesamt sechs Datenpunkte in verschiedenen Volumina berücksichtigt. Diese Datenpunkte inklusive des gefitteten Ergebnisses sind in Abb. 3.2 ab-

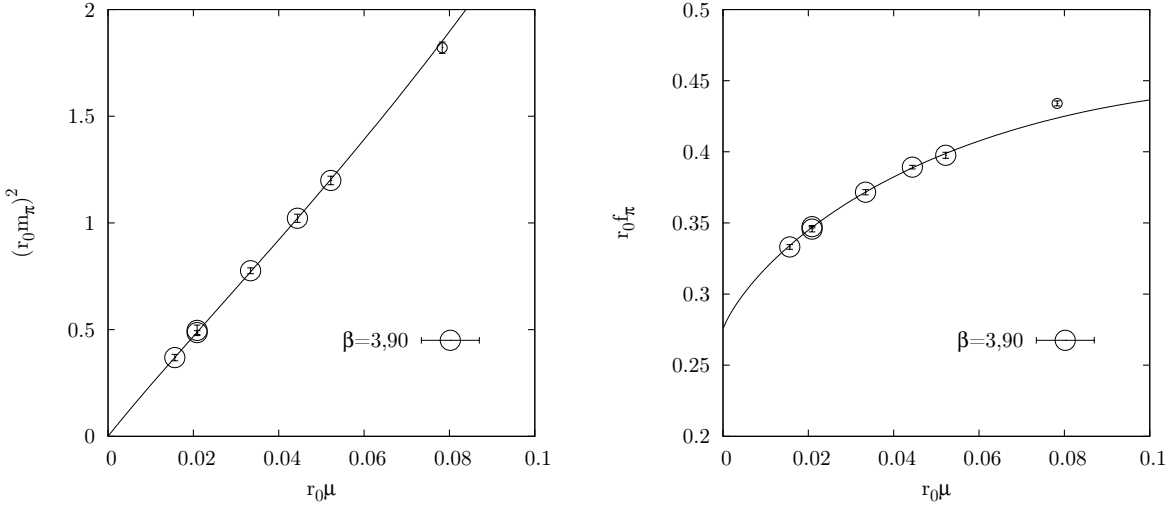


Abb. 3.2: $(r_0 m_\pi)^2$, $r_0 f_\pi$ für den Datensatz $B_{1,2,3,4,6,7}$. In den Plots sind Pionmassen und Zerfallskonstanten bereits ins unendliche Volumen extrapoliert worden. Der Punkt mit kleinem Symbol ist nicht im Fit enthalten.

gebildet. Auf der x -Achse ist $r_0 \mu$ aufgetragen, welches bei maximalem Twist proportional zur Quarkmasse ist. $(r_0 m_\pi)^2$ und $r_0 f_\pi$ sind bei maximalem Twist $\mathcal{O}(a)$ -verbessert. Zusätzlich dazu haben bis einschließlich NLO beide Größen keine Artefakte der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$. Die aufgetragenen Werte sind bereits ins unendliche Volumen extrapoliert.

Einzelfit $\beta = 4.05$

Die Situation bei $\beta = 4,05$ ist nicht so optimal wie bei $\beta = 3,90$, dennoch sind auch hier vernünftige Einzelfits möglich. Es liegen Ergebnisse bei verschiedenen Volumina vor, so dass die *finite-size*-Effekte auch sinnvoll berücksichtigt werden können (C_1 bis C_4 bei $L/a = 32$ und C_5 bei $L/a = 24$). Die Datenpunkte C_6 und C_7 spielen in diesem Teil der Analyse keine Rolle.

Die Güte der Fits in den Spalten eins und drei der Tab. 3.6 ist sehr hoch, was gemessen an der Zahl der Fitparameter auf die geringe Anzahl der Datenpunkte zurückzuführen ist. In der zweiten Spalte ist ein Punkt mit relativ hoher Quarkmasse hinzugenommen worden, wo die Gültigkeit der χ PT nicht unbedingt gegeben sein muss. Trotzdem kann dieser Punkt in den Fit aufgenommen werden, ohne im Rahmen der statistischen Fehler zu deutlich anderen Ergebnissen zu führen.

Dieser Datensatz mit den fünf Punkten ist zusammen mit dem Fit-Ergebnis der zweiten Spalte in Abb. 3.3 dargestellt. Die eingetragenen Messwerte sind bereits ins unendliche Volumen extrapoliert.

	$C_{1,2,3}$	$C_{1,2,3,4,5}$	$C_{1,2,3,5}$
$a[\text{fm}]$	0,0683(12)	0,0666(9)	0,0684(12)
\bar{l}_1	-0,40(60)	-0,38(60)	-0,38(60)
\bar{l}_2	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)
\bar{l}_3	3,70(16)	3,79(9)	3,70(16)
\bar{l}_4	4,63(8)	4,76(4)	4,63(8)
$f_0[\text{MeV}]$	121,26(81)	120,97(80)	121,27(81)
$B[\text{GeV}]$	2,765(99)	2,865(88)	2,758(98)
χ^2/dof	0,65	1,23	0,52

Tab. 3.6: Auswahl an Ergebnissen für Fits bei $\beta = 4,05$. In der zweiten Spalte werden ausreichend viele Datenpunkte einbezogen. Die Ergebnisse der verschiedenen Fits stimmen überein.

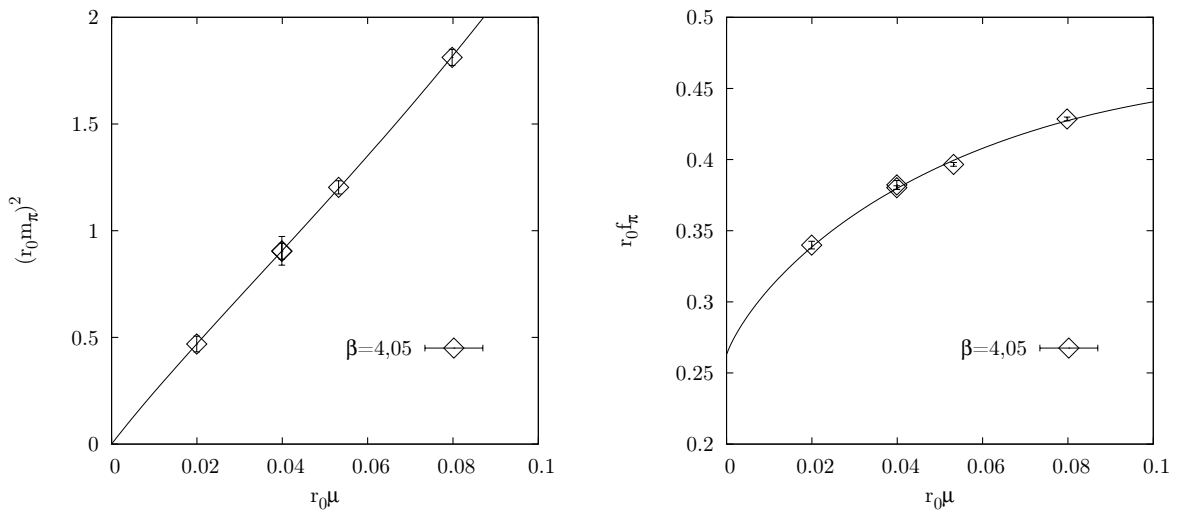


Abb. 3.3: $(r_0 m_\pi)^2$, $r_0 f_\pi$ ins unendliche Volumen extrapoliert für den Datensatz $C_{1,2,3,4,5}$ bei $\beta = 4,05$.

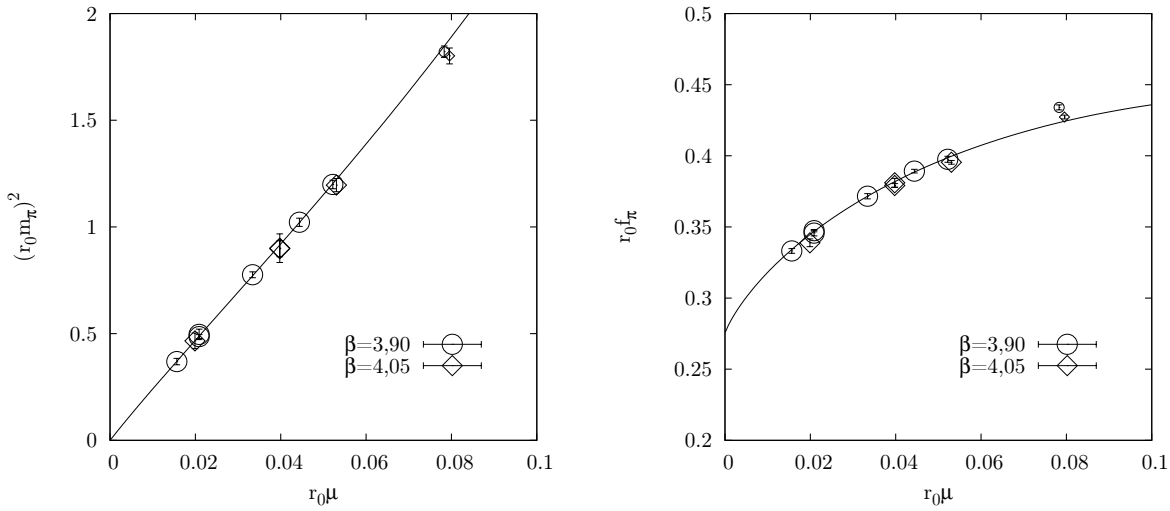


Abb. 3.4: Die Werte von $(r_0 m_\pi)^2$, $r_0 f_\pi$ und das Fit-Ergebnis der Datensätze $B_{1,2,3,4,6,7}$, $C_{1,2,3,5}$ bei $\beta = 3,90$ bzw. $\beta = 4,05$. Die Punkte mit kleinen Symbolen sind nicht im Fit enthalten.

Simultaner Fit $\beta = 3.90$ und $\beta = 4.05$

Neben den Einzelfits werden auch simultane Fits dieser beiden β -Werte durchgeführt. Die Hinzunahme eines weiteren β -Werts führt lediglich zu zwei weiteren Fitparametern bei wesentlich mehr Datenpunkten; die Zahl der Freiheitsgrade nimmt damit deutlich zu. Ein zweiter großer Vorteil ist, dass kleine systematische Abweichungen durch die zahlreichen Kombinationen von β -, μ , und L/a -Werten gut kontrolliert werden.

In Tab. 3.7 sind die Ergebnisse einiger Fits mit den zu Grunde liegenden Datensätzen aufgelistet. Der Datensatz in der ersten Spalte beinhaltet sicherlich wieder zu wenig Datenpunkte für einen zuverlässigen Fit. Im Gegensatz dazu haben die Ergebnisse in der dritten und fünften Spalte eine recht geringe Güte, weil diese Fits durch zu viele Punkte belastet werden, bei denen die Gültigkeit der χ PT nicht sicher ist.

Dagegen sind die Ergebnisse in den Spalten zwei, vier und sechs von sehr guter Qualität. Diese werden von den Datenpunkten bei kleinen Quarkmassen dominiert und greifen dennoch auf sehr viele Datenpunkte zurück. Besonders hervorzuheben ist der Datensatz, der die Grundlage des Fits in der vierten Spalte ist. Dieser Fit ist samt seiner Datenpunkte in Abb. 3.4 dargestellt.

In den Abbildungen wird deutlich, dass die Datensätze der verschiedenen β -Werte miteinander konsistent sind. Die Fitparameter in diesen simultanen Fits sind auch in guter Übereinstimmung mit denen der Einzelfits, so dass sich hier ein insgesamt überzeugendes Gesamtbild ergibt.

	$B_{1,2,3,4}$ $C_{1,2,3}$	$B_{1,2,3,4,6}$ $C_{1,2,3,5}$	$B_{1,2,3,4,5,6}$ $C_{1,2,3,4,5}$	$B_{1,2,3,4,6,7}$ $C_{1,2,3,5}$	$B_{1,2,3,4,5,6,7}$ $C_{1,2,3,4,5}$	$B_{1,2,3,6,7}$ $C_{1,2,5}$
$Z_P(3.9)$	0,4592(51)	0,4595(51)	0,4598(51)	0,4595(51)	0,4598(51)	0,4595(51)
$Z_P(4.05)$	0,4655(56)	0,4648(55)	0,4641(54)	0,4648(55)	0,4642(54)	0,4647(58)
$a(3.9)$ [fm]	0,0876(10)	0,0887(6)	0,0873(5)	0,0886(6)	0,0874(5)	0,0884(6)
$a(4.05)$ [fm]	0,0684(8)	0,0693(6)	0,0678(5)	0,0692(6)	0,0679(5)	0,0691(6)
\bar{l}_1	-0,40(60)	-0,57(60)	-0,67(60)	-0,58(60)	-0,69(60)	-0,56(60)
\bar{l}_2	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)
\bar{l}_3	3,67(9)	3,43(7)	3,56(4)	3,41(7)	3,54(4)	3,33(10)
\bar{l}_4	4,62(5)	4,60(4)	4,72(2)	4,61(4)	4,72(2)	4,65(5)
f_0 [MeV]	121,27(52)	121,33(51)	121,06(51)	121,31(51)	121,06(51)	121,23(51)
B_0 [GeV]	2,680(56)	2,572(42)	2,645(38)	2,571(38)	2,635(37)	2,566(41)
χ^2/dof	0,47	1,21	2,44	1,13	2,03	1,24

Tab. 3.7: Einige Ergebnisse zu Simultanfits von Datensätzen bei $\beta = 3,90$ und $\beta = 4,05$. Trotz der unterschiedlichen Güte der Fits sind die Ergebnisse ziemlich konsistent.

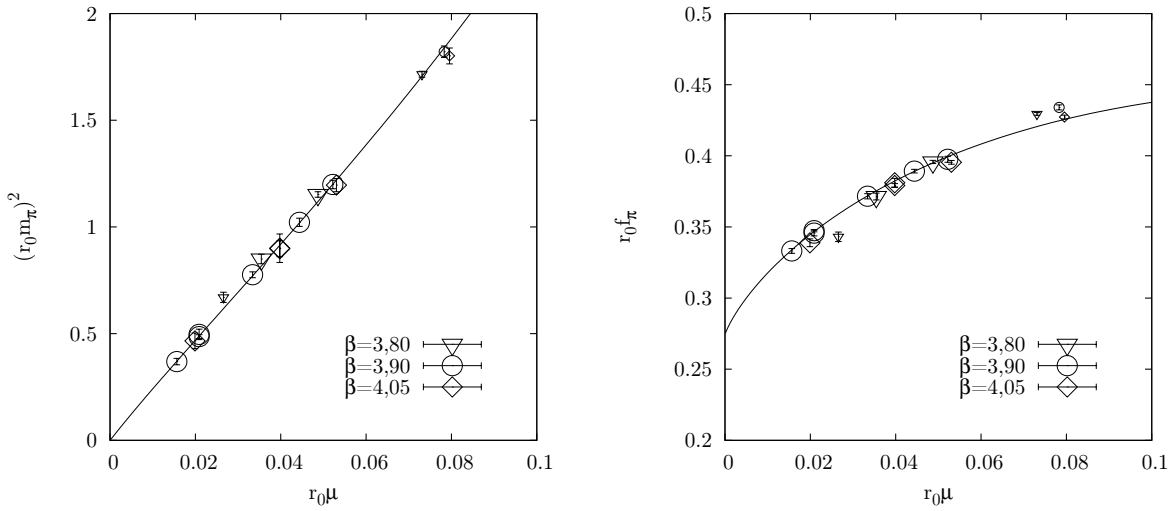


Abb. 3.5: $(r_0 m_\pi)^2$, $r_0 f_\pi$ mit herausgerechnetem *finite-size*-Effekt für die Datensätze $A_{2,3}$, $B_{1,2,3,4,6,7}$ und $C_{1,2,3,5}$. Die Daten von $\beta = 3,80$ fügen sich zu den anderen. Die Punkte mit kleinen Symbolen sind nicht im Fit enthalten.

Simultaner Fit $\beta = 3,80$, $\beta = 3,90$ und $\beta = 4,05$

Für die Messpunkte bei $\beta = 3,80$ sind keine sinnvollen Einzelfits möglich. Die Ergebnisse des vorherigen Abschnitts motivieren allerdings dazu, die dort durchgeführte Analyse auch auf Konsistenz mit den Ergebnissen für $\beta = 3,80$ zu überprüfen. Außerdem kann so auch die bisher unbekannte Gittergröße a bei $\beta = 3,80$ abgeschätzt werden.

In Tab. 3.8 sind die Ergebnisse einiger solcher Fits aufgelistet. Man sieht, dass die Ergebnisse für $\beta = 3,80$ trotz der höheren Zahl der Freiheitsgrade nicht zu einer Verbesserung führen. Gerade die Datensätze von Spalte drei und fünf führen zu schlechten Ergebnissen, die auf den Datenpunkt A_4 zurückzuführen sind. Die Ergebnisse der Spalten vier und sechs sind dagegen einigermaßen gut.

Insbesondere der Datensatz in der vierten Spalte berücksichtigt eine ausgewogene Zusammenstellung vieler Datenpunkte bei verschiedenen β -, μ , und L/a -Werten sowie kleinen Quarkmassen. Das Ergebnis ist in Abb.3.5 dargestellt. Auch wenn die Hinzunahme der Datenpunkte $\beta = 3,80$ nicht zur Verbesserung beiträgt, kann man zumindest feststellen, dass sich die Punkte A_2 und A_3 in die bisherige Analyse hinreichend gut einfügen.

	$A_{2,3}$ $B_{1,2,3,4}$ $C_{1,2,3}$	$A_{2,3}$ $B_{1,2,3,4,6}$ $C_{1,2,3,5}$	$A_{2,3,4}$ $B_{1,2,3,4,5,6}$ $C_{1,2,3,4,5}$	$A_{2,3}$ $B_{1,2,3,4,6,7}$ $C_{1,2,3,5}$	$A_{2,3,4}$ $B_{1,2,3,4,5,6,7}$ $C_{1,2,3,4,5}$	A_2 $B_{1,2,3,6,7}$ $C_{1,2,5}$
$Z_P(3.8)$	0,4322(49)	0,4326(48)	0,4367(46)	0,4326(48)	0,4369(46)	0,4203(58)
$Z_P(3.9)$	0,4521(46)	0,4516(46)	0,4512(45)	0,4517(46)	0,4512(45)	0,4551(48)
$Z_P(4.05)$	0,4574(51)	0,4562(50)	0,4527(48)	0,4560(50)	0,4526(48)	0,4605(55)
$a(3.8)$ [fm]	0,1011(13)	0,1032(10)	0,1014(7)	0,1031(9)	0,1017(7)	0,1005(12)
$a(3.9)$ [fm]	0,0867(9)	0,0885(6)	0,0866(5)	0,0884(5)	0,0869(5)	0,0883(6)
$a(4.05)$ [fm]	0,0677(8)	0,0690(6)	0,0671(5)	0,0689(6)	0,0673(5)	0,0690(6)
\bar{l}_1	-0,38(60)	-0,61(60)	-0,66(60)	-0,61(60)	-0,70(60)	-0,58(60)
\bar{l}_2	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)	4,30(10)
\bar{l}_3	3,76(8)	3,48(7)	3,65(4)	3,46(6)	3,63(4)	3,34(10)
\bar{l}_4	4,68(5)	4,62(4)	4,76(2)	4,63(4)	4,75(2)	4,65(5)
f_0 [MeV]	121,18(43)	121,28(43)	121,98(42)	121,26(43)	121,00(42)	121,21(43)
B_0 [GeV]	2,691(55)	2,544(38)	2,641(35)	2,542(36)	2,624(34)	2,546(39)
χ^2/dof	1,51	2,05	4,23	1,85	4,15	1,42

Tab. 3.8: Einige Ergebnisse zu Simultanfits von Datensätzen bei $\beta = 3,80$, $\beta = 3,90$ und $\beta = 4,05$. Die Resultate sind mit denen der Fits ohne $\beta = 3,80$ konsistent.

Zusammenfassung

Insgesamt zeigt meine Analyse, dass mit $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Twisted-Mass-Wilson-Fermionen sehr gute Resultate bei realistischen Quarkmassen erzielt werden können. Aufgrund der geringen Fehler der Datensätze würden sich auch kleine Abweichungen von qualitativen Vorhersagen der chiralen Störungstheorie bemerkbar machen.

In den präsentierten Fits sind keine $\mathcal{O}(a)$ -Gitterartefakte berücksichtigt worden, da diese bei maximalem Twist verschwinden. Als Funktion der PCAC-Quarkmasse verschwinden auch die $\mathcal{O}(a^2)$ -Terme. Zur Kontrolle habe ich diese in zusätzlichen Analysen berücksichtigt. Dabei zeigt sich, dass diese Artefakte konsistent mit null sind. Im Rahmen der Genauigkeit gibt es keine Auswirkungen auf die Fitparameter.

Auch die Volumeneffekte werden mit den von mir verwendeten Formeln gut erfasst. Beschränkt man sich auf die Volumeneffekte von Gasser und Leutwyler, werden die Fits bei kleinen Pionmassen merklich schlechter, so dass die *finite-size*-Effekte bis zur benutzten Ordnung mitgenommen werden sollten. Aufgrund des *elevator effects* müssen dafür keine Koeffizienten aus höheren Ordnungen der chiralen Störungstheorie berücksichtigt werden.

Die vertrauenswürdigsten Ergebnisse bekomme ich aus den simultanen Fits von $\beta = 3,90$ und $4,05$, weil für jeden β -Wert genügend Datenpunkte im Fit berücksichtigt werden können. Besonders überzeugend sind die Resultate in den Spalten zwei, vier und sechs der Tab. 3.7, die nur Daten bei kleinen Quarkmassen enthalten. Im Rahmen der Fehler unterscheiden sich die jeweiligen Ergebnisse nicht. Die Mittelwerte dieser drei Spalten ergeben für die aussagekräftigen Fit-Parameter die Werte

$$\bar{l}_3 = 3,41(8), \quad \bar{l}_4 = 4,63(4), \quad f_0 = 121,25(51) \text{ MeV}, \quad B_0 = 2,544(40) \text{ GeV}.$$

4 Twisted-Mass-Gitter-QCD mit $2 + 1 + 1$ leichten Quarks

4.1 Motivation

Neben den u - und d -Quarks spielt auch das $strange$ -Quark eine wichtige Rolle in der Dynamik der QCD bei niedrigen Energien. Zum einen ist es ein Baustein der Kaonen, aber es wirkt sich auch über virtuelle Effekte auf den Pion-Sektor aus. Deswegen ist es von großem Interesse, auch das $strange$ -Quark in Gittersimulationen zu berücksichtigen. In der Twisted-Mass-Gitter-Formulierung ist dieses nicht problemlos zu realisieren, da der Twistwinkel in einem Quarkdublett eingeführt wird.

Eine Möglichkeit der Realisierung besteht darin, für das leichte Quarkdublett (u, d) die Twisted-Mass-Formulierung zu benutzen und das s -Quark einzeln als normales Wilson-Fermion hinzuzufügen. In einem solchen Set-Up versagt aber die allgemeine Gültigkeit der automatischen $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung. Für diesen Fall wurde das auch im Rahmen der chiralen Störungstheorie bestätigt [A].

Es ist aber auch möglich, ein weiteres komplettes Quarkdublett hinzuzufügen (c, s) und damit einen zweiten Twistwinkel in dem neuen Dublett einzuführen [B]. Das hat den Vorteil, dass beide Dubletts mit einer ähnlichen Wirkung formuliert und simuliert werden können. Um die Dubletts zu unterscheiden, wird im Folgenden auch vom „leichten“ und „schweren“ Sektor gesprochen und zur Unterscheidung werden die Indizes l und h benutzt.

In dieser Formulierung kann außerdem durch zweifach maximalen Twist $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung realisiert werden. Es ist interessant, wie sich die physikalischen Eigenschaften der leichten Pionen und Kaonen in Abhängigkeit dieser Winkel nahe dem chiralen Limes verhalten. Dies kann mit Hilfe der chiralen Störungstheorie untersucht werden.

4.2 Simulation

4.2.1 Wirkung

Für das SU(3) Eichfeld wird wie in der Simulation der Zwei-Flavour-QCD die *treelevel improved* Symanzik-Wirkung (tlSym) verwendet, siehe Gl. (3.1). Die Fermionwirkung setzt sich aus den Wirkungen der beiden Sektoren zusammen

$$S_F = S_{F,l} + S_{F,h}.$$

Im leichten Sektor ist

$$Q_l[y, x, U] = \delta_{x,y} [1 + i2\kappa_l a \mu_l \gamma_5 \tau_3] - \kappa_l \sum_{\mu} \left[\delta_{x+\hat{\mu},y} U_{\mu}(x) [r - \gamma_{\mu}] + \delta_{x-\hat{\mu},y} U_{\mu}(x - \hat{\mu})^{\dagger} [r + \gamma_{\mu}] \right].$$

Im schweren Sektor muss neben dem Twist auch eine Massenaufspaltung zwischen s - und c -Quark berücksichtigt werden. Um die Positivität der Fermiondeterminante zu gewährleisten, muss diese orthogonal zum Twistwinkel implementiert werden [14, 15, 54]. Damit der reelle Massenterm diagonal ist, wird die Massenaufspaltung im schweren Sektor durch τ_3 und der Twistwinkel durch τ_1 realisiert, so dass die Dirac-Matrix im schweren Sektor

$$Q_h[y, x, U] = \delta_{x,y} [1 + i2\kappa_h a \mu_h \gamma_5 \tau_1 + a \mu_{\delta} \tau_3] - \kappa_h \sum_{\mu} \left[\delta_{x+\hat{\mu},y} U_{\mu}(x) [r - \gamma_{\mu}] + \delta_{x-\hat{\mu},y} U_{\mu}(x - \hat{\mu})^{\dagger} [r + \gamma_{\mu}] \right]$$

lautet.

4.2.2 PCAC-Quarkmasse

Um $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung zu realisieren, müssen die Komponenten der PCAC-Quarkmasse richtig eingestellt werden. Es ist deswegen wichtig zu verstehen, wie diese in 2+1+1-Flavour-QCD zu verstehen sind.

Im leichten Sektor wurde in Kapitel 1 bereits gezeigt, wie aus der Ward-Identität die entsprechende PCAC-Quarkmasse hergeleitet wird. Im schweren Sektor ist die Situation ein wenig anders, da es eine Quarkmassen-Aufspaltung in τ_3 - und einen Twistwinkel in τ_1 -Richtung gibt. In diesem Fall lautet die Ward-Identität für die ungetwisteten Ströme in der *twisted basis*

$$\partial_{\mu} A_{\mu,h}^a = 2am_{\chi,h}^{\text{PCAC}} P_h^a + \begin{cases} + i2Z_A^{-1} a \mu_h S_h^0, & a = 1, \\ 0, & a = 2, \\ - i2Z_A^{-1} a \mu_{\delta} P_h^0, & a = 3, \end{cases}$$

so dass man $m_{\chi,h}^{\text{PCAC}}$ prinzipiell mit $a = 2$ bekommen kann. Alternativ kann man auch durch $\partial_\mu A_{\mu,h}^K$ und $\partial_\mu A_{\mu,h}^D$ die Quarkmassen $m_{\chi,s}^{\text{PCAC}}$ und $m_{\chi,c}^{\text{PCAC}}$ bestimmen und dann über

$$2m_{\chi,h}^{\text{PCAC}} = m_{\chi,s}^{\text{PCAC}} + m_{\chi,c}^{\text{PCAC}}$$

den Twistwinkel definieren.

Die physikalischen PCAC-Quarkmassen können wiederum aus den physikalischen Strömen bestimmt werden [B]. Diese Quarkmassen sind dann mit den ungetwisteten PCAC-Quarkmassen über

$$\begin{aligned} m_l^{\text{PCAC}} &= \frac{1}{Z_P} \sqrt{(Z_A m_{\chi,l}^{\text{PCAC}})^2 + \mu_l^2} \\ m_{c,s}^{\text{PCAC}} &= \frac{1}{Z_P} \sqrt{(Z_A m_{\chi,h}^{\text{PCAC}})^2 + \mu_h^2} \pm \frac{1}{Z_S} \mu_\delta \end{aligned}$$

verbunden. Für $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung müssen beide Twistwinkel maximal sein bzw.

$$m_{\chi,l}^{\text{PCAC}} = m_{\chi,h}^{\text{PCAC}} = 0.$$

Die Bedingung des zweifach maximalen Twists kann gelockert werden, da die Abweichung zwischen den PCAC-Quarkmassen der beiden Sektoren im chiralen Grenzfall unter bestimmten Bedingungen nur von Ordnung a ist. Um das zu zeigen, wird zunächst ein einzelnes Quarkdublett betrachtet.

Die kritische Masse kann durch die Bedingung verschwindender PCAC-Quarkmasse definiert werden. Berücksichtigt man die Verschiebung durch die Gitterartefakte, dann ist

$$am_\chi^{\text{PCAC}} = am_0 - f(g_0, am_0, a\mu_0).$$

Aufgrund der Symmetrien der Gitterwirkung tritt $a\mu_0$ aber in niedrigster Potenz quadratisch auf, so dass

$$am_\chi^{\text{PCAC}} = am_0 - f(g_0, am_0) + \mathcal{O}(a^2).$$

Dies kann auf den vorliegenden Fall zweier Dubletts verallgemeinert werden und die Symmetriebedingungen für μ_l , μ_h und μ_δ führen zu den Gleichungen

$$\begin{aligned} am_{\chi,l}^{\text{PCAC}} &= am_{0,l} - f_l(g_0, am_0) + \mathcal{O}(a^2), \\ am_{\chi,h}^{\text{PCAC}} &= am_{0,h} - f_h(g_0, am_0) + \mathcal{O}(a^2). \end{aligned}$$

Für $am_{0,l} = am_{0,h}$ unterscheiden sich dann $am_{\chi,l}^{\text{PCAC}}$ und $am_{\chi,h}^{\text{PCAC}}$ um Ordnung a bzw.

$$m_{\chi,l}^{\text{PCAC}} = m_{\chi,h}^{\text{PCAC}} + \mathcal{O}(a).$$

Daraus kann man die Konsequenz ziehen, dass es ausreicht, im leichten Sektor maximalen Twist zu realisieren und $\kappa_l = \kappa_h$ zu wählen. Im schweren Sektor muss dann ein Gitterartefakt von Ordnung a in der physikalischen PCAC-Quarkmasse berücksichtigt werden. Da im schweren Sektor die Quarkmassen aber deutlich größer sind als im leichten, ist der Effekt eher gering.

4.2.3 Ausblick

Zur Zeit werden von der ETM-Kollaboration umfangreiche Simulationen bei maximalem Twist durchgeführt [55]. Diesem Projekt war ein anderes vorgeschaltet, in welchem die Möglichkeiten und Eigenschaften der $2 + 1 + 1$ -Formulierung untersucht wurden [B]. Im Hinblick auf das aktuelle Projekt werden im Folgenden die zentralen Ergebnisse zusammengefasst.

Auf zwei Gittern der Größen $12^3 \times 24$ und $16^3 \times 32$ sind bei jeweils festem β die κ -Werte so gewählt, dass in kleinen Schritten von positiver zu negativer PCAC-Quarkmasse im leichten Sektor variiert wird. Dabei treten im Übergangsbereich Metastabilitäten auf, die auf dem 12er Gitter sehr stark sind und auf einen Phasenübergang erster Ordnung hindeuten.

Bei negativer Quarkmasse $m_{\chi,l}^{\text{PCAC}}$ fluktuieren die kleinen Eigenwerte sehr stark, was zu einer Verschlechterung der Statistik und damit zu größeren Unsicherheiten führt, vgl. auch mit der Ein-Flavour-QCD in Abschnitt 5.2. Solche Quarkmassen werden in der umfangreichen $2 + 1 + 1$ -Simulation nicht berücksichtigt.

Es hat sich bestätigt, dass bei kleinem $m_{\chi,l}^{\text{PCAC}}$ auch im schweren Sektor näherungsweise maximaler Twist realisiert ist. Wegen des großen μ_h gilt diese Aussage auch, wenn im leichten Sektor der Twistwinkel nicht annähernd erreicht ist. Damit ist der Ansatz ausreichend gerechtfertigt, allein im leichten Sektor maximalen Twist zu fordern.

In führender Ordnung können mit der chiralen Störungstheorie Pion- und Kaonmassen erfasst werden. Z. B. liegt eine Extrapolation des Verhältnisses m_π/m_K zu $m_{\chi,l}^{\text{PCAC}} = 0$ in der Nähe des physikalischen Werts. Insgesamt besteht die Hoffnung, dass bei konstanter (verschwindender) PCAC-Quarkmasse chirale Störungstheorie angewendet werden kann. Die genaue Form ist nicht klar, allerdings kommt in erster Linie die χ PT für zwei oder drei Quarkflavour in Frage. Die Besonderheiten des zweifachen Twists können aber erst in einer vollen Vier-Flavour-Störungstheorie mit vier „kleinen“ Quarkmassen untersucht werden. Aufgrund des *charm*-Quarks konvergiert diese Entwicklung bei realistischen Quarkmasse nicht.

4.3 χ PT für $2 + 1 + 1$ Quarks

In diesem Abschnitt entwickle ich die χ PT für $N_f = 2 + 1 + 1$ Quarkflavour, d. h. es wird ein entartetes Quarkdublett (u, d) und ein zweites (c, s) mit unterschiedlichen Massen in chiraler Störungstheorie betrachtet.

I. Allg. kann der chirale Twist auf verschiedene Art und Weise in die Quarkmatrix eingeführt werden. Im speziellen Fall von zwei separaten Twistwinkeln in beiden Sektoren, der in den Simulationen der ETM-Kollaboration gewählt wurde, werden die beiden Twistwinkel mit $\hat{\omega}_l$ und $\hat{\omega}_h$ bezeichnet.

Wie bereits erwähnt, liegt für realistische Werte der *charm*-Quarkmassen die chirale Störungstheorie sicherlich außerhalb ihres Gültigkeitsbereiches. Selbst die Konvergenz der Drei-Flavour- χ PT mit realistischer *s*-Quarkmasse ist unsicher. Die Ergebnisse aus dieser Analyse sind deswegen weniger für eine quantitative Analyse der Resultate gedacht. Sie geben aber Aufschluss über die strukturellen Eigenschaften der Theorie und damit insbesondere über die Abhängigkeit der leichten Mesonenmassen von den Massen und dem Twistwinkel im schweren Sektor.

4.3.1 Verallgemeinerte Generatoren

Die Störungstheorie lässt sich für eine beliebige Anzahl von Quarkflavour entwickeln. Für die Fälle $N_f = 2, 3$ werden üblicherweise die Pauli- bzw. die Gell-Mann-Matrizen verwendet, um die Felder in der Exponentialdarstellung zu parametrisieren. Entscheidend für die Wahl der Generatoren der $SU(N_f)$ ist, dass sie spurlos sind; außerdem sollten die physikalischen Zustände mit den kanonischen Feldern eng verwandt sein. Da die Flavour-diagonalen Zustände mischen, ist die Festlegung dort mehr oder weniger beliebig. Orientiert man sich an den in der Natur gegebenen Beziehungen

$$m_{u,d} \ll m_s \ll m_c \ll \dots,$$

kann man diesen Grenzfall zur Grundlage einer kanonischen Realisierung nehmen: Im Fall von $N_f = 3$ ist in dieser Basis die Mischung zwischen dem neutralen Pion π^0 und dem η z. B. proportional zum Verhältnis

$$\frac{m_d - m_u}{m_s}$$

und verschwindet im obigen Grenzfall.

Mit dieser Herangehensweise können die Pauli- und Gell-Mann-Matrizen verallgemeinert werden. Dazu ist zunächst $\sigma_{1;i,j}$, $i, j = 1 \dots N_f$ die N_f -dimensionale Matrix mit lediglich zwei nicht verschwindenden Einträgen 1 jeweils in Reihe/Zeile ij und ji . Des Weiteren ist $\sigma_{2;i,j}$ die Matrix mit den Einträgen i bei ij und $-i$ bei ji und schließlich ist

$$\sigma_{3;i} = \sqrt{\frac{2}{i(i-1)}} \text{diag}(\underbrace{1, \dots, 1}_{i-1}, 1-i, \underbrace{0, \dots, 0}_{N_f-i}).$$

Aus diesen allgemeinen Definitionen können z. B. die gewöhnlichen Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \sigma_{1;1,2} = \sigma_{1;2,1} \\ \sigma_2 &= -\sigma_{2;1,2} = \sigma_{2;2,1} \\ \sigma_3 &= \sigma_{3;2} \end{aligned}$$

gewonnen werden.

Die N_f -dimensionalen „verallgemeinerten Gell-Mann-Matrizen“ sind

$$\lambda_{i,j} = \begin{cases} \sigma_{1;i,j}, & i < j, \\ \sigma_{2;i,j}, & i > j, \\ \sigma_{3;i}, & i = j \end{cases}$$

mit $i + j > 1$ für alle $N_f > 1$. In dieser Notation spiegeln die Indizes auch den Seequark-Inhalt der entsprechenden Mesonen wider. Die übliche Notation λ_n , $n = 1 \dots N_f^2 - 1$ erhält man nun aus der Zuordnung

$$\begin{aligned} \lambda_{i,j} &\longrightarrow \lambda_n \\ (i, j) &\longmapsto n = \begin{cases} (j-1)^2 + 2i - 2, & i \leq j, \\ (i-1)^2 + 2j - 1, & i > j. \end{cases} \end{aligned}$$

Diese bilden einen Satz von spurlosen, hermiteschen Generatoren, die sich im Fall $N_f = 2, 3$ zu den gewöhnlichen Pauli- und Gell-Mann-Matrizen reduzieren. Die expliziten Generatoren für $N_f = 2 + 1 + 1$ sind in Appendix A aufgeführt.

Mithilfe der allgemeinen Generatoren lassen sich die Massen der Goldstone-Bosonen in führender Ordnung gut wiedergeben: die Massenmatrix der quadrierten Mesonmassen ist durch

$$B_0 \cdot \text{Re}(\langle \lambda_{i,j} \lambda_{k,l} m_q \rangle), \quad \text{mit } m_q = \text{diag}(m_1, \dots, m_N)$$

bestimmt. Ist bei einem Meson mindestens ein Flavour-nichtdiagonaler Generator involviert, d. h. $i \neq j$ oder $k \neq l$, dann ist die entsprechende Untermatrix

$$m_{i,j;k,l}^2 = B_0 \cdot \text{Re}(\langle \lambda_{i,j} \lambda_{k,l} m \rangle) = \delta_{ik} \delta_{jl} B_0(m_i + m_j)$$

eine diagonale $N_f(N_f - 1)$ Matrix mit den Diagonalelementen

$$m_{i,j}^2 = B_0 \cdot \text{Re}(\langle \lambda_{i,j} \lambda_{i,j} m \rangle) = B_0(m_i + m_j). \quad (4.1)$$

Im Fall $N_f = 3$ mit $i = u, d, s$ und $j = \bar{u}, \bar{d}, \bar{s}$ bekommt man in LO so z. B.

$$\begin{aligned} m_{\pi^\pm}^2 &\equiv m_{u\bar{d}}^2 = m_{d\bar{u}}^2 = B_0(m_u + m_d) \\ m_{K^\pm}^2 &\equiv m_{u\bar{s}}^2 = m_{s\bar{u}}^2 = B_0(m_u + m_s) \\ m_{K^0}^2 &\equiv m_{d\bar{s}}^2 = m_{s\bar{d}}^2 = B_0(m_d + m_s). \end{aligned}$$

Sind beide Generatoren diagonal wird die Situation wegen der Mischungen ein wenig komplexer. Für $2 \leq i \leq j \leq N$ ist die entsprechende $N_f - 1$ -dimensionale Untermatrix der

Mesonmassen durch

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\langle \lambda_{i,i} \lambda_{j,j} m \rangle) &= \frac{2(i-1)}{\sqrt{i(i-1)j(j-1)}} [\bar{m}_{i-1} - m_i] + 2\delta_{ij} m_i \\ &= \frac{2(1-\delta_{ij})(i-1)}{\sqrt{i(i-1)j(j-1)}} [\bar{m}_{i-1} - m_i] + \frac{2}{i} \delta_{ij} [(i-1)m_i + \bar{m}_{i-1}] \\ &= \begin{pmatrix} m_2 + m_1 & \frac{1}{\sqrt{3}}(m_1 - m_2) & \frac{1}{\sqrt{6}}(m_1 - m_2) & \cdots \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(m_1 - m_2) & \frac{2}{3}(2m_3 + \bar{m}_2) & \frac{2}{\sqrt{3}\sqrt{6}}(\bar{m}_2 - m_3) & \cdots \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(m_1 - m_2) & \frac{2}{\sqrt{3}\sqrt{6}}(\bar{m}_2 - m_3) & \frac{2}{4}(3m_4 + \bar{m}_3) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

gegeben, wobei

$$\bar{m}_i = \frac{1}{i} \sum_{n=1}^i m_n$$

der Durchschnitt aller Massen von m_1 bis m_i ist. Die Massen der flavour-diagonalen Mesonen $m_{\pi^0}^2$, $m_{\eta_s}^2$, $m_{\eta_c}^2$ usw. bestimmen sich aus den Eigenwerten der Matrix.

4.3.2 Felder der SU(4)

Die 15 kartesischen Feldkomponenten ϕ_a der SU(4) werden nach ihren physikalischen Verwandten benannt und im Feldvektor $\vec{\phi} = (\vec{\pi}, \vec{K}, \eta_8, \vec{D}, \vec{D}_s, \eta_{15})^\top$ zusammengefasst. Die einzelnen Untervektoren setzen sich aus den kartesischen Feldkomponenten

$$\vec{\pi} = \begin{pmatrix} \pi_1 \\ \pi_2 \\ \pi_3 \end{pmatrix}, \quad \vec{K} = \begin{pmatrix} K_4 \\ K_5 \\ K_6 \\ K_7 \end{pmatrix}, \quad \vec{D} = \begin{pmatrix} D_9 \\ D_{10} \\ D_{11} \\ D_{12} \end{pmatrix}, \quad \vec{D}_s = \begin{pmatrix} D_{s,13} \\ D_{s,14} \end{pmatrix}$$

zusammen. Diese können durch einfache Linearkombinationen den physikalischen Feldern zugeordnet werden:

$$\begin{aligned} \pi^\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_1 \mp i\pi_2), & \pi^0 &= \pi_3, \\ K^\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}(K_4 \mp iK_5), & K^0, \bar{K}^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(K_6 \mp iK_7), \\ D^\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}(D_{11} \pm iD_{12}), & D^0, \bar{D}^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(D_9 \pm iD_{10}), \\ D_s^\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}(D_{s,13} \pm iD_{s,14}). \end{aligned}$$

Die Feldkonfigurationsmatrix $\frac{1}{\sqrt{2}}\lambda_a\phi_a$ setzt sich aus den Generatoren λ_a aus Appendix A und den Feldern ϕ_a zusammen und hat in den physikalischen Komponenten die Form

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^0 + \frac{1}{\sqrt{6}}\eta_8 + \frac{1}{\sqrt{12}}\eta_{15} & \pi^+ & K^+ & \bar{D}^0 \\ \pi^- & -\frac{1}{\sqrt{2}}\pi^0 + \frac{1}{\sqrt{6}}\eta_8 + \frac{1}{\sqrt{12}}\eta_{15} & K^0 & D^- \\ K^- & \bar{K}^0 & -\frac{2}{\sqrt{6}}\eta_8 + \frac{1}{\sqrt{12}}\eta_{15} & D_s^- \\ D^0 & D^+ & D_s^+ & -\frac{3}{\sqrt{12}}\eta_{15} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Diese ist der Konstruktion der verallgemeinerten Gell-Mann-Matrizen folgend nach größer werdenden Quarkmassen angeordnet und ähnelt der in [52]. In der Literatur wird die Matrix auch oft mit vertauschten s - und c -Quarks dargestellt [53], damit die korrekte Anordnung innerhalb der beiden Quarkdoublets erhalten bleibt. Im Rahmen der chiralen Störungstheorie um den masselosen Grenzfall ist das hier gewählte Vorgehen vorteilhaft.

4.3.3 Parametrisierung

Der Twistwinkel wird im (u, d) -Sektor mittels τ_3 implementiert, im (c, s) -Dublett mit τ_1 . Aufgrund der Definition der Felder in Gl. (4.2) ändert der Twistwinkel allerdings sein Vorzeichen, weil aufgrund der Massenhierarchie $s \leftrightarrow c$ getauscht ist. Das Massensplitting wird mit τ_3 einbezogen [A, B].

Für den 2 + 1 + 1-Fall wird dieselbe Strategie verwendet wie schon bei nur einem Quarkdoublett. Damit werden die Vorteile beider Basisdarstellungen genutzt, um letztendlich zu einem basisunabhängigen Ergebnis zu gelangen. Die Bezeichnungen entsprechen denen bei zwei Flavours verwendeten, siehe Appendix B.

Aufgespalten in den leichten und schweren Sektor, hat der symmetriebrechende Massen- und Gitterterm in der *twisted basis* die Form

$$\chi' = \begin{cases} \chi'_{0,l} + i\chi'_3\tau_3 & \text{in } (u, d), \\ \chi'_{0,h} + i\chi'_1\tau_1 + \chi_\delta\tau_3 & \text{in } (c, s) \end{cases}$$

und in der *physical basis*

$$\chi^* = \begin{cases} \chi_{0,l} + \rho_{0,l} + i\rho_3\tau_3 & \text{in } (u, d), \\ \chi_{0,h} + \rho_{0,h} + i\rho_1\tau_1 + \chi_\delta\tau_3 & \text{in } (c, s). \end{cases}$$

Die neu eingeführten Größen sind

$$\chi'_1 = 2B_0\mu_h, \quad \chi_\delta = B_0(m_c - m_s), \quad \rho_1 = 2W_0 \sin(\omega_h).$$

Analog zur Zwei-Flavour-QCD werden Kosinus und Sinus der Winkel $\omega_{0,l}$ und $\omega_{0,h}$ mit $c_{0,l}$, $s_{0,l}$ und $c_{0,h}$, $s_{0,h}$ bezeichnet.

4.3.4 Mesonmassen in führender Ordnung

In führender Ordnung lassen sich die Massen des Mesonmultipletts mit der allgemeinen Formel aus Gl. (4.1) recht gut bestimmen. In der *twisted basis* bekommt man für die Flavour-

nichtdiagonalen Mesonen

$$\begin{aligned} m_\pi^2 &= \sqrt{\chi_{0,l}'^2 + \chi_3'^2}, \\ m_{D,K}^2 &= \frac{1}{2} \left[\sqrt{\chi_{0,l}'^2 + \chi_3'^2} + \sqrt{\chi_{0,h}'^2 + \chi_1'^2} \pm \chi_\delta \right], \\ m_{D_s}^2 &= \sqrt{\chi_{0,h}'^2 + \chi_1'^2}. \end{aligned}$$

Ignoriert man zunächst die Mischung der Flavour-neutralen Bosonen, erhält man für die η -Mesonen

$$\begin{aligned} m_{\eta_8}^2 &= \frac{1}{3} [4m_K^2 - m_\pi^2], \\ m_{\eta_{15}}^2 &= \frac{1}{6} [9m_D^2 + m_K^2 - 4m_\pi^2] \end{aligned}$$

und somit auch die verallgemeinerte Gell-Mann-Okubo Massenformel

$$\begin{aligned} 4m_K^2 &= 3m_{\eta_8}^2 + m_\pi^2, \\ m_K^2 + 9m_D^2 &= 6m_{\eta_{15}}^2 + 4m_\pi^2, \\ m_K^2 + m_D^2 &= m_{D_s}^2 + m_\pi^2. \end{aligned}$$

Mischung

In Vier-Flavour-QCD gibt es i. Allg. Mischungen zwischen den Mesonen des Flavour-neutralen Multipletts

$$|\pi_3\rangle = \frac{|u\bar{u}\rangle - |d\bar{d}\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\eta_8\rangle = \frac{|u\bar{u}\rangle + |d\bar{d}\rangle - 2|s\bar{s}\rangle}{\sqrt{6}}, \quad |\eta_{15}\rangle = \frac{|u\bar{u}\rangle + |d\bar{d}\rangle + |s\bar{s}\rangle - 3|c\bar{c}\rangle}{\sqrt{12}}$$

und dem Singulett

$$|\eta_{\mathbf{1}}\rangle = \frac{|u\bar{u}\rangle + |d\bar{d}\rangle + |s\bar{s}\rangle + |c\bar{c}\rangle}{2},$$

die schließlich in den physikalischen Zuständen π^0 , η , η_c und η' resultieren. Bei vollständiger Isospin-Symmetrie mischt π_3 nicht mit den η 's. Im Gültigkeitsbereich der χ PT kann aufgrund der Anomalie auch das η' ausintegriert werden, so dass dieses ebenfalls nicht in der gewöhnlichen Störungstheorie berücksichtigt werden muss. Damit verbleibt die Mischung von η_8 und η_{15} .

Die physikalischen Zustände η , η_c der Massen-diagonalen Basis werden durch

$$\begin{pmatrix} \eta \\ \eta_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_8 \\ \eta_{15} \end{pmatrix}$$

festgelegt, in führender Ordnung ist

$$\theta = \frac{1}{2} \arctan \left(\underbrace{\sqrt{8} \left[1 + \frac{9}{2} \frac{m_D^2 - m_K^2}{m_K^2 - m_\pi^2} \right]^{-1}}_{\text{arg}} \right). \quad (4.3)$$

Die Massen in dieser neuen Basis sind

$$\begin{aligned} m_\eta^2 &= m_{\eta_8}^2 - \Delta_{s,c}, \\ m_{\eta_c}^2 &= m_{\eta_{15}}^2 + \Delta_{s,c} \end{aligned}$$

mit dem Aufspaltungsterm

$$\begin{aligned} \Delta_{s,c} &= (m_{\eta_{15}}^2 - m_{\eta_8}^2) \frac{\sqrt{1 + \text{arg}^2} - 1}{2} \\ &= (m_{\eta_{15}}^2 - m_{\eta_8}^2) \frac{\sin^2 \theta}{\cos 2\theta} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{3} [m_K^2 - m_\pi^2] \tan \theta. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Mit dem Mischungswinkel θ bzw. den physikalischen η -Massen in führender Ordnung können die Massen der Pionen, Kaonen und prinzipiell auch der D - und D_s -Mesonen bestimmt werden.

4.3.5 Kontaktterme für p^2 und m^2

Im Folgenden werden die benötigten Kontaktterme in der kartesischen Basis analysiert und den physikalischen Zuständen zugeordnet. Da im Folgenden nur Pionen und Kaonen untersucht werden, sind hier auch nur die dafür relevanten Teile angegeben. Die vollständigen Formeln sind in Appendix D aufgeführt.

Der für die Feldrenormierung und Zerfallskonstanten relevante Teil der Lagrangedichte enthält alle Terme $\partial_\mu \phi_a$ und lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{loop}, p^2} &= -\frac{1}{4!} \frac{1}{F_0^2} \left[-4 [(\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi})^2 - |\vec{\pi}|^2 |\partial_\mu \vec{\pi}|^2] - [(\vec{K} \partial_\mu \vec{K})^2 - |\vec{K}|^2 |\partial_\mu \vec{K}|^2] \right. \\ &\quad + |\vec{\pi}|^2 |\partial_\mu \vec{K}|^2 + |\vec{K}|^2 |\partial_\mu \vec{\pi}|^2 + |\vec{\pi}|^2 |\partial_\mu \vec{D}|^2 + |\vec{D}|^2 |\partial_\mu \vec{\pi}|^2 \\ &\quad + 3 [K_4^2 (\partial_\mu K_5)^2 + K_5^2 (\partial_\mu K_4)^2 + K_6^2 (\partial_\mu K_7)^2 + K_7^2 (\partial_\mu K_6)^2] \\ &\quad + [K_4^2 + K_5^2] [(\partial_\mu D_9)^2 + (\partial_\mu D_{10})^2] + [K_6^2 + K_7^2] [(\partial_\mu D_{11})^2 + (\partial_\mu D_{12})^2] \\ &\quad + [D_9^2 + D_{10}^2] [(\partial_\mu K_4)^2 + (\partial_\mu K_5)^2] + [D_{11}^2 + D_{12}^2] [(\partial_\mu K_6)^2 + (\partial_\mu K_7)^2] \\ &\quad + |\vec{K}|^2 |\partial_\mu \vec{D}_s|^2 + |\partial_\mu \vec{K}|^2 |\vec{D}_s|^2 + 3 [|\vec{K}|^2 (\partial_\mu \eta_8)^2 + |\partial_\mu \vec{K}|^2 \eta_8^2] \\ &\quad \left. + D, D_s \text{ und } \eta\text{-Terme} \right] \end{aligned}$$

Diese Terme werden durch das Diagramm in Abb. 2.3 grafisch dargestellt. Auch in der Vier-Flavour-Theorie gelten die Symmetrieüberlegungen aus Kapitel 2, so dass keine Kontaktterme auftreten, die einen 3-Vertex enthalten.

Der für die Massen benötigte Teil enthält alle Terme der Form $\phi_a^2 \phi_b^2$ und wird grafisch durch Abb. 2.1 beschrieben; er hat die Gestalt

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{loop},m^2} = & -\frac{1}{4!} \frac{1}{F_0^2} \left[+ m_\pi^2 |\vec{\pi}|^4 + m_K^2 |\vec{K}|^4 + (m_\pi^2 + m_K^2) |\vec{\pi}|^2 |\vec{K}|^2 \right. \\ & + (m_\pi^2 + m_D^2) |\vec{\pi}|^2 |\vec{D}|^2 + (m_K^2 + m_{D_s}^2) |\vec{K}|^2 |\vec{D}_s|^2 \\ & + (m_K^2 + m_D^2) [K_4^2 + K_5^2] [D_9^2 + D_{10}^2] \\ & + (m_K^2 + m_D^2) [K_6^2 + K_7^2] [D_{11}^2 + D_{12}^2] \\ & + m_\pi^2 |\vec{\pi}|^2 [\sqrt{2}\eta_8 + \eta_{15}]^2 \\ & + |\vec{K}|^2 [(3m_{\eta_8}^2 - m_K^2)\eta_8^2 + m_K^2\eta_{15}^2 - \sqrt{2}(2m_K^2 - m_\pi^2)\eta_8\eta_{15}] \\ & \left. + D, D_s \text{ und } \eta\text{-Terme} \right]. \end{aligned}$$

Aus diesen Teilen der Lagrangedichte können die vollständigen Ein-Loop-Beiträge der Pionen und Kaonen vollständig bestimmt werden. Die Schwierigkeit liegt in der θ -Abhängigkeit der Kontaktterme.

Ein-Loop-Beiträge zu den Pionmassen

Um die θ -Abhängigkeit zu isolieren, wird für die Pionen die Funktion

$$\xi_1(\theta) = \sqrt{2} \sin 2\theta - \sin^2 \theta \quad \in [0, 1]$$

definiert. Der angegebene Wertebereich umfasst diejenigen Werte, die je nach Wahl der s - und c -Quarkmasse möglich sind. Der von der Mischung abhängige Kontaktterm wird nun in die physikalische Basis transformiert:

$$[\sqrt{2}\eta_8 + \eta_{15}]^2 = [2 + \xi_1(\theta)]\eta^2 + [1 - \xi_1(\theta)]\eta_c^2 + [\sqrt{8} \cos 2\theta - \sin 2\theta]\eta\eta_c.$$

Dieser Ausdruck aus $\mathcal{L}_{\text{loop},m^2}$ führt zum Loop-Beitrag

$$\frac{m_\pi^2}{12F_0^2} [(2 + \xi_1)I(m_\eta^2) + (1 - \xi_1)I(m_{\eta_c}^2)],$$

wobei hier $I(m^2)$ das divergente Integral aus Gl. (2.2) auf S. 20 ist. Die gesammelten Korrekturen zum Massen- und Impulsterm sind

$$\begin{aligned} \Sigma_{m^2}^\pi &= -\frac{m_\pi^2}{6F_0^2} \left[I(m_\pi^2) + 2I(m_K^2) + 2I(m_D^2) + \frac{2+\xi_1}{2}I(m_\eta^2) + \frac{1-\xi_1}{2}I(m_{\eta_c}^2) \right], \\ \Sigma_{p^2}^\pi &= -\frac{1}{6F_0^2} [4I(m_\pi^2) + 2I(m_K^2) + 2I(m_D^2)], \end{aligned}$$

so dass bei der Pionmasse insgesamt ein Loop-Beitrag von

$$\text{Loop} = \frac{m_\pi^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[2m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{2 + \xi_1}{3} m_\eta^2 \ln \left(\frac{m_\eta^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{1 - \xi_1}{3} m_{\eta_c}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_c}^2}{\Lambda^2} \right) \right]$$

berücksichtigt werden muss.

Aufgrund der winkelabhängigen Funktion $\xi_1(\theta)$ ist nicht direkt ersichtlich, wie es sich mit der Divergenz des Ausdruckes verhält. Deswegen wird der divergente Term $\sim R$ extra betrachtet. Man findet unter Berücksichtigung von Gl. (4.4)

$$(2 + \xi_1)m_\eta^2 + (1 - \xi_1)m_{\eta_c}^2 = 2m_{\eta_8}^2 + m_{\eta_{15}}^2 - \frac{4}{3}[m_K^2 - m_\pi^2].$$

Somit hängt die Divergenz dieser Loop-Beiträge

$$\begin{aligned} & R \frac{m_\pi^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[2m_\pi^2 - \frac{2}{3}m_{\eta_8}^2 - \frac{1}{3}m_{\eta_{15}}^2 + \frac{4}{9}(m_K^2 - m_\pi^2) \right] \\ &= R \frac{m_\pi^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[\frac{3}{2}m_\pi^2 - \frac{1}{2}m_{D_s}^2 \right] \end{aligned}$$

nicht explizit vom Mischwinkel θ ab.

Ein-Loop-Beiträge zu den Kaonmassen

Die Analyse für die Kaonen erfolgt nach demselben Schema, allerdings treten bei den Kaonen in beiden Teilen der Lagrangedichte Terme auf, die vom Mischwinkel abhängen. Für die Terme aus $\mathcal{L}_{\text{loop},m^2}$ definiert man

$$\xi_2(\theta) = 5 \sin^2 \theta - \sqrt{2} \sin \theta \cos \theta \in \left[\frac{5-3\sqrt{3}}{2}, 1 \right].$$

Mit der provisorischen Variable

$$\tilde{\xi}_2(\theta) = \xi_2(\theta) - 3 \sin^2 \theta$$

kann unter Verwendung der Gl. (4.4) der Kontaktterm

$$\begin{aligned} & [(3m_{\eta_8}^2 - m_K^2)\eta_8^2 + m_K^2\eta_{15}^2 - \sqrt{2}(2m_K^2 - m_\pi^2)\eta_8\eta_{15}] \\ &= [3m_\eta \cos^2 \theta - m_K^2(1 - \tilde{\xi}_2)]\eta^2 + [3m_{\eta_c} \sin^2 \theta + m_K^2(1 - \tilde{\xi}_2)]\eta_c^2 \\ & - (\sin 2\theta + \sqrt{2} \cos 2\theta)[2m_K^2 - m_\pi^2]\eta\eta_c^2 \end{aligned}$$

in die physikalische Basis überführt werden. Daraus resultiert der vom Mischwinkel abhängige Beitrag

$$\frac{m_K^2}{12F_0^2} \left[-(1 - \tilde{\xi}_2)I(m_\eta^2) + (1 - \tilde{\xi}_2)I(m_{\eta_c}^2) \right] + \frac{m_\eta^2 \cos^2 \theta}{4F_0^2} I(m_\eta^2) + \frac{m_{\eta_c}^2 \sin^2 \theta}{4F_0^2} I(m_{\eta_c}^2).$$

Betrachtet man nun noch den relevanten Term aus dem anderen Teil der Lagrangedichte $\mathcal{L}_{\text{loop},m^2}$

$$\begin{aligned} & [|\vec{K}|^2(\partial_\mu\eta_8)^2 + |\partial_\mu\vec{K}|^2\eta_8^2] \\ = & + [|\vec{K}|^2(\partial_\mu\eta)^2 + |\partial_\mu\vec{K}|^2\eta^2] \cos^2\theta + [|\vec{K}|^2(\partial_\mu\eta_c)^2 + |\partial_\mu\vec{K}|^2\eta_c^2] \sin^2\theta \\ & - [|\vec{K}|^2(\partial_\mu\eta\partial_\mu\eta_c) + |\partial_\mu\vec{K}|^2\eta\eta_c] \sin 2\theta, \end{aligned}$$

so muss man zusätzlich

$$\frac{1}{12F_0^2} [3\cos^2\theta I(m_\eta^2) + 3\sin^2\theta I(m_{\eta_c}^2)]$$

berücksichtigen. Insgesamt findet man schließlich für den Massen- und den Impulsterm die Korrekturen

$$\begin{aligned} \Sigma_{m^2}^K &= -\frac{m_K^2}{12F_0^2} \left[3I(m_\pi^2) + 6I(m_K^2) + 2I(m_D^2) + 2I(m_{D_s}^2) \right. \\ &\quad \left. - (1 - \tilde{\xi}_2)I(m_\eta^2) + (1 - \tilde{\xi}_2)I(m_{\eta_c}^2) \right], \\ \Sigma_{p^2}^K &= -\frac{1}{12F_0^2} \left[3I(m_\pi^2) + 6I(m_K^2) + 2I(m_D^2) + 2I(m_{D_s}^2) \right. \\ &\quad \left. + (3 - 3\sin^2\theta)I(m_\eta^2) + 3\sin^2\theta I(m_{\eta_c}^2) \right], \end{aligned}$$

aus denen sich der vollständige Loop-Beitrag zu den Kaonmassen zusammensetzt:

$$\text{Loop} = \frac{m_K^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[\frac{4 - \xi_2}{3} m_\eta^2 \ln\left(\frac{m_\eta^2}{\Lambda^2}\right) - \frac{1 - \xi_2}{3} m_{\eta_c}^2 \ln\left(\frac{m_{\eta_c}^2}{\Lambda^2}\right) \right].$$

Die explizite Überprüfung der Divergenz $\sim R$ führt analog zu den Pionen zu

$$(4 - \xi_2)m_\eta^2 - (1 - \xi_2)m_{\eta_c}^2 = 4m_{\eta_8}^2 - m_{\eta_{15}}^2 - \frac{2}{3}[m_K^2 - m_\pi^2],$$

so dass die gesamte Divergenz unabhängig vom Mischwinkel θ durch

$$\begin{aligned} & R \frac{m_K^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[\frac{4}{3}m_{\eta_8}^2 - \frac{1}{3}m_{\eta_{15}}^2 - \frac{2}{9}(m_K^2 - m_\pi^2) \right] \\ = & R \frac{m_K^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[2m_K^2 - \frac{1}{2}(m_{D_s}^2 + m_\pi^2) \right] \end{aligned}$$

gegeben ist.

4.3.6 Vakuumwinkel und PCAC-Quarkmasse in nächstführender Ordnung

Bevor man die Pion- und Kaonmassen auch auf Treelevel bestimmen kann, müssen noch das Vakuum bzw. die zwei Vakuumwinkel der Theorie bestimmt werden. Im leichten Sektor findet

man

$$\hat{\omega}_l = \omega_{0,l} - \frac{8}{F_0^2} \frac{\rho s_{0,l}}{m_\pi^2} \left\{ m_\pi^2 2W - m_{D_s}^2 [4L_6 - 2W_6] + \rho c_{0,l} 4W' + \rho c_{0,h} 4[L_6 - W_6 + W'_6] \right\},$$

woraus sich mittels Gl. (1.9) und (1.10) die PCAC-Quarkmassen

$$\begin{aligned} \chi'_{\text{PCAC},l} &= \chi'_{0,l} + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^2 \rho 2W - m_{D_s}^2 \rho [4L_6 - 2W_6] \right. \\ &\quad \left. + \rho^2 c_{0,l} 4W' + \rho^2 c_{0,h} 4[L_6 - W_6 + W'_6] \right\}, \\ \chi_{\text{PCAC},l} &= m_\pi^2 + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_\pi^2 \rho c_{0,l} 2W - m_{D_s}^2 \rho c_{0,l} [4L_6 - 2W_6] \right. \\ &\quad \left. + \rho^2 c_{0,l}^2 4W' + \rho^2 c_{0,l} c_{0,h} 4[L_6 - W_6 + W'_6] \right\} \end{aligned}$$

berechnen lassen.

Im schweren Sektor ist der zweite Vakuumwinkel durch

$$\hat{\omega}_h = \omega_{0,h} - \frac{8}{F_0^2} \frac{\rho s_{0,h}}{m_{D_s}^2} \left\{ m_{D_s}^2 2W - m_\pi^2 [4L_6 - 2W_6] + \rho c_{0,h} 4W' + \rho c_{0,l} 4[L_6 - W_6 + W'_6] \right\}$$

gegeben und liefert die zugehörigen PCAC-Quarkmassen

$$\begin{aligned} \chi'_{\text{PCAC},h} &= \chi'_{0,h} + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_{D_s}^2 \rho 2W - m_\pi^2 \rho [4L_6 - 2W_6] \right. \\ &\quad \left. + \rho^2 c_{0,h} 4W' + \rho^2 c_{0,l} 4[L_6 - W_6 + W'_6] \right\}, \\ \chi_{\text{PCAC},h} &= m_{D_s}^2 + \frac{8}{F_0^2} \left\{ m_{D_s}^2 \rho c_{0,h} 2W - m_\pi^2 \rho c_{0,h} [4L_6 - 2W_6] \right. \\ &\quad \left. + \rho^2 c_{0,h}^2 4W' + \rho^2 c_{0,l} c_{0,h} 4[L_6 - W_6 + W'_6] \right\}. \end{aligned}$$

Für den am Anfang des Kapitels besprochenen Fall, dass in der Simulation $\kappa_l = \kappa_h$ gesetzt wird, d. h. $\chi'_{0,l} = \chi'_{0,h}$, ist die Differenz der ungetwisteten PCAC-Quarkmassen

$$\chi'_{\text{PCAC},h} - \chi'_{\text{PCAC},l} = \frac{8}{F_0^2} (m_{D_s}^2 - m_\pi^2) \rho [W_8 - L_8] + \mathcal{O}(a^2)$$

mit der Abkürzung W aus Gl. (2.3) auch in χ_{PT} von $\mathcal{O}(a)$.

4.3.7 Pion- und Kaonmassen in nächstführender Ordnung

Mit den Loop-Beiträgen und den Vakuumwinkeln sind alle benötigten Größen bestimmt, um die Pion- und Kaonmassen in basisunabhängiger Form anzugeben.

Für die geladenen Pionen erhält man den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 M_\pi^2 = m_\pi^2 &+ \frac{m_\pi^2}{4(4\pi F_0)^2} \left[2m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{2+\xi_1}{3} m_\eta^2 \ln \left(\frac{m_\eta^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{1-\xi_1}{3} m_{\eta_c}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_c}^2}{\Lambda^2} \right) \right] \\
 &+ \frac{8}{F_0^2} \left[m_\pi^4 \cdot [2(L_8 + 2L_6) - (L_5 + 2L_4)] + m_\pi^2 m_{D_s}^2 \cdot 2[2L_6 - L_4] \right. \\
 &- \rho m_\pi^2 \hat{c}_l \cdot [4(L_8 + 2L_6) - (L_5 + 2L_4) - 2(W_8 + 2W_6) + (W_5 + 2W_4)] \\
 &+ \rho m_\pi^2 \hat{c}_h \cdot 2[L_4 - W_4] \\
 &- \rho (m_{D_s}^2 \hat{c}_l + m_\pi^2 \hat{c}_h) \cdot 2[2L_6 - W_6] \\
 &+ \rho^2 \hat{c}_l^2 \cdot 2[(L_8 + 2L_6) - (W_8 + 2W_6) + (W_8' + 2W_6')] \\
 &\left. + \rho^2 \hat{c}_l \hat{c}_h \cdot 4[L_6 - W_6 + W_6'] \right]
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

mit

$$\xi_1 = \xi_1(\theta) = \sqrt{2} \sin 2\theta - \sin^2 \theta.$$

Des Weiteren unterscheidet sich das neutrale Pion aufgrund des Twists in τ_3 -Richtung von den geladenen durch

$$M_\pi^2 - M_{\pi_3}^2 = \frac{16\rho^2 \hat{s}_l^2}{F_0^2} [(L_8 + 2L_6) - (W_8 + 2W_6) + (W_8' + 2W_6')].$$

Die Pionmasse ist erwartungsgemäß $\mathcal{O}(a)$ -verbessert, wenn beide Winkel bei maximalem Twist sind. Insbesondere führt ein nicht-maximaler Twistwinkel im schweren Sektor dazu, dass das Pion durch $\mathcal{O}(a)$ -Terme proportional zu $\rho m_\pi^2 \hat{c}_h$ kontaminiert wird.

Für die Kaonen, welche in NLO entartet sind, bekommt man

$$\begin{aligned}
 M_K^2 = m_K^2 &+ \frac{m_K^2}{4(4\pi F_0)^2} \left[\frac{4-\xi_2}{3} m_\eta^2 \ln \left(\frac{m_\eta^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{1-\xi_2}{3} m_{\eta_c}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_c}^2}{\Lambda^2} \right) \right] \\
 &+ \frac{4}{F_0^2} \left[m_K^4 \cdot 2[2(L_8 + 4L_6) - (L_5 + 4L_4)] + m_K^2 (m_D^2 - m_K^2) \cdot 4[2L_6 - L_4] \right. \\
 &- \rho m_K^2 (\hat{c}_l + \hat{c}_h) \cdot [4(L_8 + 4L_6) - (L_5 + 4L_4) - 2(W_8 + 4W_6) + (W_5 + 4W_4)] \\
 &- \rho (m_D^2 - m_K^2) (\hat{c}_l + \hat{c}_h) \cdot 2[2L_6 - W_6] \\
 &+ \rho^2 (\hat{c}_l + \hat{c}_h)^2 \cdot [(L_8 + 4L_6) - (W_8 + 4W_6) + (W_8' + 4W_6')] \\
 &\left. - \rho^2 (\hat{s}_l^2 + \hat{s}_h^2) \cdot [L_8 - W_8 + W_8'] \right],
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

wobei hier

$$\xi_2 = \xi_2(\theta) = 5 \sin^2 \theta - \sqrt{2} \sin \theta \cos \theta.$$

Pionmasse als Funktion der PCAC-Quarkmassen

Die Masse der geladenen Pionen als Funktion der PCAC-Quarkmassen ist

$$\begin{aligned}
 M_\pi^2 = & \chi_{\text{PCAC},l} + \frac{8}{F_0^2} \left[\chi_{\text{PCAC},l}^2 \cdot [2(L_8 + 2L_6) - (L_5 + 2L_4)] \right. \\
 & + \chi_{\text{PCAC},l} \chi_{\text{PCAC},h} \cdot 2[2L_6 - L_4] \\
 & - \rho \chi'_{\text{PCAC},l} \cdot [2(L_8 + 2L_6) - (L_5 + 2L_4) - (W_8 + 2W_6) + (W_5 + 2W_4)] \\
 & \left. - \rho \frac{\chi_{\text{PCAC},l} \chi'_{\text{PCAC},h}}{\chi_{\text{PCAC},h}} \cdot 2[2L_6 - L_4 - W_6 + W_4] \right] + \text{Loop}.
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Auch in Vier-Flavour- χ PT gibt es in dieser Form keine expliziten Beiträge der Ordnung a^2 .

4.3.8 Ein-Loop-Beiträge zu den Zerfallskonstanten

Kontaktterme für p

Für die Zerfallskonstanten des Mesons ϕ_a sind die Kontaktterme der Form

$$\frac{1}{6F_0} \phi_c^2 A_{c,a}^{\text{loop}} \partial_\mu \phi_a$$

relevant; die $A_{c,a}^{\text{loop}}$ sind die jeweils auftretenden Faktoren mit der Randbedingung

$$\sum_c A_{c,a}^{\text{loop}} = 4N_f.$$

Diese Koeffizienten können zu einer 15×15 -Matrix zusammengefasst werden, welche in Appendix D aufgeführt ist. Die für die Pionen und Kaonen relevante 15×7 -Matrix ist in Tab. 4.1 angegeben. Die Kontaktterme werden, wie in Kapitel 2 beschrieben, durch

$$-\frac{1}{6F_0} \langle (0 | \phi_c^2 A_{c,a}^{\text{loop}} \partial_\mu \phi_a | \pi_b(\vec{p}) \rangle = iF_0 p_\mu \delta_{ab} \cdot A_{c,a}^{\text{loop}} \frac{1}{6F_0^2} I(m_c).$$

kontrahiert. Summation über alle Kontraktionen ergibt unter Berücksichtigung der Feldnormierung durch Σ_{p^2}

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{6F_0^2} \sum_c A_{c,\pi}^{\text{loop}} I(m_c) - \frac{1}{2\Sigma_{p^2}^\pi} &= \frac{1}{F_0^2} [I(m_\pi) + \frac{1}{2}I(m_K) + \frac{1}{2}I(m_D)], \\
 -\frac{1}{6F_0^2} \sum_c A_{c,K}^{\text{loop}} I(m_c) - \frac{1}{2\Sigma_{p^2}^K} &= \frac{1}{F_0^2} \left[\frac{3}{8}I(m_\pi) + \frac{3}{4}I(m_K) + \frac{1}{4}I(m_D) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{4}I(m_{D_s}) + \frac{3}{8} \cos^2 \theta I(m_\eta) + \frac{3}{8} \sin^2 \theta I(m_{\eta_c}) \right].
 \end{aligned}$$

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc|c} 0 & 4 & 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ 4 & 0 & 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ 4 & 4 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ \hline 1 & 1 & 1 + \sqrt{3} & 0 & 4 & 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 + \sqrt{3} & 4 & 0 & 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 - \sqrt{3} & 1 & 1 & 0 & 4 & \\ 1 & 1 & 1 - \sqrt{3} & 1 & 1 & 4 & 0 & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 3 & 3 & 3 & 3 & \dots \\ \hline 1 & 1 & 1 + \sqrt{1/3} + \sqrt{2/3} & 1 & 1 & 0 & 0 & \\ 1 & 1 & 1 + \sqrt{1/3} + \sqrt{2/3} & 1 & 1 & 0 & 0 & \\ 1 & 1 & 1 - \sqrt{1/3} - \sqrt{2/3} & 0 & 0 & 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 - \sqrt{1/3} - \sqrt{2/3} & 0 & 0 & 1 & 1 & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \end{array} \right)$$

Tab. 4.1: Die für die Pionen und Kaonen relevante 15×7 -Untermatrix der Koeffizienten-Matrix $A_{c,a}^{\text{loop}}$. Die Summe der Einträge einer Spalte ist $4N_f$.

Ein-Loop-Beiträge zur Pion-Zerfallskonstante

Für die Pionen ist die Situation einfach, da die η -Mischungen nicht berücksichtigt werden müssen. Man erhält

$$\text{Loop} = -\frac{N_f}{2(4\pi F_0)^2} \left[\frac{1}{2} m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{4} m_K^2 \ln \left(\frac{m_K^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{4} m_D^2 \ln \left(\frac{m_D^2}{\Lambda^2} \right) \right].$$

Ein-Loop-Beiträge zur Kaon-Zerfallskonstante

Für die Kaonen-Zerfallskonstante muss wie auch schon bei der Masse die Transformation in die physikalische η -Basis durchgeführt werden. Dazu wird

$$\xi_3(\theta) = 3 \sin^2 \theta \quad \in [0, 1]$$

definiert, so dass

$$3\eta_8^2 = [3 - \xi_3(\theta)]\eta^2 + \xi_3(\theta)\eta_c^2 - \sin(2\theta)\eta\eta_c.$$

Hieraus ergibt sich der gesamte Loop-Beitrag

$$\text{Loop} = -\frac{N_f}{2(4\pi F_0)^2} \left[\frac{3}{16} m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{3}{8} m_K^2 \ln \left(\frac{m_K^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{8} m_D^2 \ln \left(\frac{m_D^2}{\Lambda^2} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{8} m_{D_s}^2 \ln \left(\frac{m_{D_s}^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{3 - \xi_3}{16} m_\eta^2 \ln \left(\frac{m_\eta^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{\xi_3}{16} m_{\eta_c}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_c}^2}{\Lambda^2} \right) \right].$$

Für die Divergenz $\sim R$ gilt für die Loop-Terme der Kaon-Zerfallskonstanten

$$(3 - \xi_3)m_\eta^2 + \xi_3 m_{\eta_c}^2 = 4m_K - m_\pi,$$

so dass die gesamte Divergenz unabhängig vom Mischwinkel

$$R \frac{N_f}{2(4\pi F_0)^2} \left[\frac{1}{4}(m_{D_s}^2 + m_\pi^2) + \frac{1}{2}m_K^2 \right]$$

beträgt.

4.3.9 Pion- und Kaon-Zerfallskonstanten in nächstführender Ordnung

Zusammen mit den Treelevel-Termen erhält man für die Pion-Zerfallskonstante in nächstführender Ordnung

$$\begin{aligned} \frac{F_\pi}{F_0} = 1 - \frac{2}{(4\pi F_0)^2} & \left[\frac{1}{2}m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{4}m_K^2 \ln \left(\frac{m_K^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{4}m_D^2 \ln \left(\frac{m_D^2}{\Lambda^2} \right) \right] \\ & + \frac{4}{F_0^2} \left[m_\pi^2 \cdot L_5 + \frac{1}{2}(m_\pi^2 + m_{D_s}^2) \cdot 4L_4 \right. \\ & \left. - \rho c_l \cdot [L_5 - W_5] - \rho \frac{1}{2}(c_l + c_h) \cdot 4[L_4 - W_4] \right]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die Kaon-Zerfallskonstante ist

$$\begin{aligned} \frac{F_K}{F_0} = 1 - \frac{2}{(4\pi F_0)^2} & \left[\frac{3}{16}m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{3}{8}m_K^2 \ln \left(\frac{m_K^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{8}m_D^2 \ln \left(\frac{m_D^2}{\Lambda^2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{8}m_{D_s}^2 \ln \left(\frac{m_{D_s}^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{3 - \xi_3}{16}m_\eta^2 \ln \left(\frac{m_\eta^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{\xi_3}{16}m_{\eta_c}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_c}^2}{\Lambda^2} \right) \right] \\ & + \frac{4}{F_0^2} \left[m_K^2 \cdot L_5 + \frac{1}{2}(m_\pi^2 + m_{D_s}^2) \cdot 4L_4 - \rho \frac{1}{2}(c_l + c_h) \cdot [(L_5 - W_5) + 4(L_4 - W_4)] \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

mit $\xi_3(\theta) = 3 \sin^2(\theta)$.

Auch hier wird deutlich, dass man für die $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung im Pion-Sektor maximalen Twist im schweren Sektor benötigt.

4.3.10 Der Spezialfall SU(2 + 2)

Im speziellen Fall eines ebenfalls entarteten schweren Sektors liegt die Situation SU(2 + 2) vor, die bereits in [53] betrachtet wurde. In diesem Fall können die physikalischen Felder η_s

und η_c durch die Generatoren (siehe Appendix A)

$$\sqrt{2}\lambda_8^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \lambda_{15}^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

in die Feldkonfigurationsmatrix eingeführt werden, ohne dass Mischungen auftreten. Dies ist äquivalent dazu, ausgehend von den gewöhnlichen Gell-Mann-Generatoren, den analytischen Mischwinkel

$$\theta = \arctan\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \approx 0.196 \pi,$$

zu benutzen, was genau der obigen Redefinition der Generatoren entspricht. Insbesondere nehmen die drei eingeführten Funktionen

$$\xi_1(\theta) = \xi_2(\theta) = \xi_3(\theta) = 1$$

ihren Maximalwert an.

In diesem Spezialfall ist auch das Teilchenspektrum deutlich einfacher: Anstatt sechs verschiedener Mesonmassen in führender Ordnung gibt es nur noch die drei

$$\begin{aligned} m_\pi^2 &= \sqrt{\chi_{0,l}'^2 + \chi_3'^2}, \\ m_K^2 = m_D^2 = m_\eta^2 &= \frac{1}{2} \left[\sqrt{\chi_{0,l}'^2 + \chi_3'^2} + \sqrt{\chi_{0,h}'^2 + \chi_1'^2} \right], \\ m_{D_s}^2 = m_{\eta_c}^2 &= \sqrt{\chi_{0,h}'^2 + \chi_1'^2}. \end{aligned}$$

Allerdings ist der Übergang von $2+1+1$ zu $2+2$ nicht analytisch. In nächstführender Ordnung gibt es nämlich aufgrund der Twistwinkel i. Allg. Mischungen zwischen den Mesonen. Im allgemeinen Fall $m_s \neq m_c$ treten diese Effekte erst in NNLO auf und sind mit einer Nicht-Analytizität in $m_s - m_c$ verbunden. Insbesondere führt dies zu einer Massenaufspaltung zwischen einzelnen Kaonen und D -Mesonen

$$M_{K^\pm}^2 - M_{K^0}^2 = M_{D^\pm}^2 - M_{D^0}^2 = \frac{16\rho^2 s_{0,l} s_{0,h}}{F_0^2} [L_8 - W_8 + W_8'],$$

wobei die oben angegebene Formel (4.6) für M_K^2 gerade der durchschnittlichen Masse der beiden Mesonenarten entspricht. Dieses Massensplitting ist ein reiner Gittereffekt. In diesem Spezialfall stimmen die resultierenden Formeln auf Treelevel exakt mit den in Ref. [53] bestimmten überein.

Loop-Terme

Bei den Loop-Termen sieht die Situation allerdings anders aus. Ein Vergleich dieser Ausdrücke führt bei den Massen zu

$$\begin{aligned} & \frac{m_K^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[m_\eta^2 \ln \left(\frac{m_\eta^2}{\Lambda^2} \right) \right] \quad (\text{hier}) \\ & \neq \frac{m_K^2}{N_f(4\pi F_0)^2} \left[\frac{4}{3} m_{\eta_8}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_8}^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{1}{3} m_{\eta_{15}}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_{15}}^2}{\Lambda^2} \right) \right] \quad (\text{in [53]}) . \end{aligned}$$

Dies zeigt, dass in der zitierten Arbeit die η -Mesonen nicht in der physikalischen Basis betrachtet wurden. Das wäre nur zulässig, wenn die Felder η_8 und η_{15} die physikalischen Zustände wären, was aber wiederum nur bei $m_s = m_{u,d}$ der Fall ist. Für die Loop-Divergenzen in Ref. [53] hat dies die Konsequenz, dass diese sich nur im trivialen Fall $m_l = m_h$ mit den Treelevel-Divergenzen aufheben.

Der Vergleich der Kaon-Zerfallskonstanten

$$\begin{aligned} & \frac{N_f}{2(4\pi F_0)^2} \left[\frac{3}{16} m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{5}{8} m_K^2 \ln \left(\frac{m_K^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{3}{16} m_{D_s}^2 \ln \left(\frac{m_{D_s}^2}{\Lambda^2} \right) \right] \quad (\text{hier}) \\ & \neq \frac{N_f}{2(4\pi F_0)^2} \left[\frac{3}{16} m_\pi^2 \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{2} m_K^2 \ln \left(\frac{m_K^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{3}{16} m_{\eta_8}^2 \ln \left(\frac{m_{\eta_8}^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{1}{8} m_{D_s}^2 \ln \left(\frac{m_{D_s}^2}{\Lambda^2} \right) \right] \end{aligned}$$

führt zum gleichen Ergebnis.

Zusammenfassung

Es ist möglich, in der 2 + 1 + 1-Twisted-Mass-Formulierung Simulationen mit vier dynamischen Quarks durchzuführen [B]. Insbesondere lässt sich eine allgemeine, automatische $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung effektiv durch Feineinstellung der ungetwisteten PCAC-Quarkmasse im leichten Sektor erreichen.

Im Rahmen der chiralen Störungstheorie habe ich das Zusammenwirken von Quarkmassen und Twistwinkeln entwickelt und dargestellt. Aufgrund der Mischungen der η -Mesonen muss die Lagrangedichte in die physikalische Basis transformiert werden, um die Loop-Beiträge korrekt zu behandeln. Insgesamt zeigt sich, dass die Massen und Zerfallskonstanten der Pionen und Kaonen zweifach maximalen Twist benötigen, um frei von jeglichen $\mathcal{O}(a)$ -Gitterartefakten zu sein.

5 Ein-Flavour-QCD

5.1 Motivation

Im Standardmodell beschreibt die QCD die starke Wechselwirkung mit drei Quarkfarben und sechs Quark-Flavours. Bei niedrigen Energien werden die Eigenschaften der QCD nur unter Berücksichtigung der leichten Quarks betrachtet. Das zugehörige Teilchenspektrum wird z. B. durch die spontane Brechung der chiralen Symmetrie und der damit verbundenen Existenz von Goldstone-Bosonen gut verstanden. Es gibt aber auch weitere interessante Aspekte, die nicht mit der chiralen Symmetriebrechung verbunden sind. Die Ein-Flavour-QCD ist ein mögliches Experimentierfeld, um einige dieser Eigenschaften der QCD zu untersuchen [C, D, F].

Die abelsche Symmetrie der Ein-Flavour-QCD ist aufgrund der Bell-Adler-Jackiw-Anomalie gebrochen. Es verbleibt lediglich die vektorielle $U_V(1)$ -Symmetrie, die mit der Quarkzahl-Erhaltung verknüpft ist. Damit gibt es im Gegensatz zur gewöhnlichen QCD keine spontan gebrochene chirale Symmetrie und deswegen auch keine naheliegende Möglichkeit, den Punkt im Parameterraum zu bestimmen, bei dem Quarkmassen verschwinden [56, 57, 58, 59]. In der herkömmlichen QCD ist dieser Punkt z. B. durch das Verschwinden der Massen der Goldstone-Bosonen definiert.

Unter der Annahme einer positiven Fermion-Determinante haben Vafa und Witten gezeigt [60], dass Paritäts- und Ladungskonjugations-Symmetrie spontan nicht gebrochen werden können; bei negativen Quarkmassen kann diese Möglichkeit dennoch gegeben sein, da die Positivität des fermionischen Maßes nicht mehr gewährleistet ist [61]. Diese Fragestellung kann unter den Bedingungen der Ein-Flavour-QCD untersucht werden. Die Übergangslinie wird in der komplex erweiterten Massenebene auf der negativen reellen Achse erwartet. Dieser Übergang kann zwar für Mehr-Flavour-Theorien bei den physikalischen Quarkmassen ausgeschlossen werden, aber dennoch Einfluss auf reale Gittersimulationen haben.

Ein interessanter theoretischer Aspekt ist die Äquivalenz von Ein-Flavour-QCD mit der supersymmetrischen Yang-Mills Theorie mit einer Superladung ($\mathcal{N} = 1$) im Grenzfall unendlicher Farbladungen $N_c \rightarrow \infty$ [62, 63, 64, 65]. Dieser Zusammenhang wird als *orientifold planar equivalence* bezeichnet und motiviert im Fall $N_c = 3$ eine ungefähre Übereinstimmung der skalaren und pseudoskalaren Masse von Ein-Flavour-QCD mit der effektiven Niederenergie-Wirkung für $\mathcal{N} = 1$ -Supersymmetrie von Veneziano-Yankielovicz [66].

5.1.1 CP Verletzung

Die Lagrangedichte der Ein-Flavour-QCD entspricht der der Standard-QCD aus Gl. (1.1) auf Seite 4, wobei der Flavour-Index entfällt. Der Quarkmassenterm ist von der einfachen Form

$$\bar{\psi} m \psi \tag{5.1}$$

mit der skalaren Masse m . Ein Basiswechsel

$$\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi} e^{i\gamma_5 \theta/2}, \quad \psi \rightarrow e^{i\gamma_5 \theta/2} \psi$$

lässt abgesehen vom Massenterm die Lagrangedichte unverändert; der veränderliche Massenterm wird zu

$$\bar{\psi} m_1 \psi + i \bar{\psi} m_5 \gamma_5 \psi.$$

Dieser Term der Form $i \bar{\psi} \gamma_5 \psi$ bricht die CP -Symmetrie explizit.

Fasst man m zu einer komplexen Masse

$$m = |m| e^{i\theta}$$

zusammen, so kann der Massenterm durch die rechts- und linkshändigen Feldkomponenten $\psi_{R,L}$ als

$$\bar{\psi}_L m \psi_R + \bar{\psi}_R m^* \psi_L$$

ausgedrückt werden, welches im reellen Fall direkt auf die Ausgangsform aus Gl. (5.1) zurückführt. Die klassische Theorie bleibt von dieser Phase θ unbeeinflusst, quantenmechanisch ist diese Symmetrie allerdings gebrochen. Der in Kapitel 1 erwähnte topologische Term \mathcal{L}_θ , der prinzipiell auch in der Lagrangedichte auftauchen kann, ist redundant, weil dieser in die Phase von m absorbiert werden kann. Auch die Gitterregularisierung bricht diese Symmetrie: In der Wilson-Gitter-Formulierung stellt θ eine relative Phase zwischen Massen- und Wilson-Term dar.

Bei negativer reeller Quarkmasse besteht zudem die Möglichkeit, dass die CP -Symmetrie auch spontan gebrochen werden kann [56, 57, 58, 59], d. h. der Erwartungswert

$$\langle \bar{\psi} \gamma_5 \psi \rangle \neq 0$$

hat einen endlichen Wert. Die Situation der expliziten und spontanen CP -Verletzung ist in Abb. 5.1 veranschaulicht. Aktuell werden Analysen bei unterschiedlichen Quarkmassen durchgeführt, um eine mögliche CP -Verletzung und einen Phasenübergang zu finden. Die bisherigen Resultate sind noch nicht eindeutig.

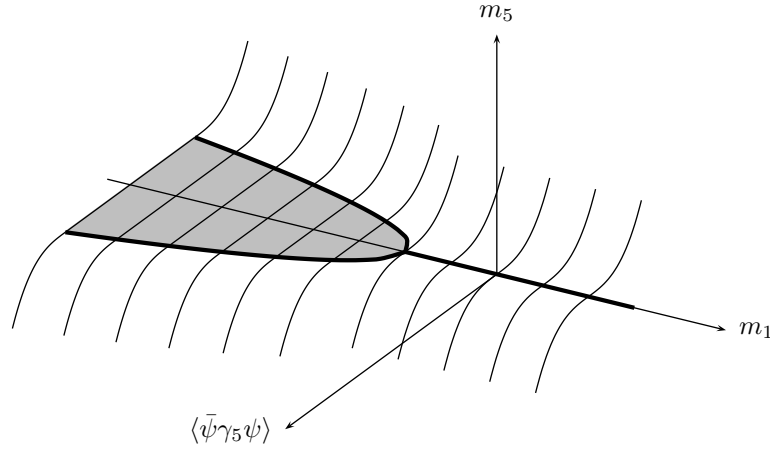


Abb. 5.1: Explizite und spontane CP -Verletzung in der komplexen Massenebene. Die dünnen Kurven veranschaulichen die Symmetriebrechung $\langle \bar{\psi} \gamma_5 \psi \rangle$ bei festen Werten der reellen Quarkmasse m_1 . Die dicke Linie zeigt die möglichen Werte bei imaginärer Quarkmasse $m_5 = 0$. Bei negativer reeller Quarkmasse $m_1 < 0$ kann die Symmetrie auch spontan brechen und einen endlichen Erwartungswert $\langle \bar{\psi} \gamma_5 \psi \rangle$ hervorbringen.

5.2 Simulation

5.2.1 Gitterwirkung

Für das $SU(3)$ Eichfeld wird die *treelevel improved* Symanzik-Wirkung (tlSym) verwendet. Diese hat neben der (1×1) Wilson-Plaquette zusätzlich einen rechteckigen (1×2) Wilson-Loop, so dass

$$S_G[U] = \beta \sum_x \left[c_0 \sum_{\mu < \nu} \operatorname{Re} \langle 1 - \frac{1}{3} U_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x) \rangle + c_1 \sum_{\mu \neq \nu} \operatorname{Re} \langle 1 - \frac{1}{3} U_{\mu\nu}^{1 \times 2}(x) \rangle \right]$$

unter den Bedingungen $c_0 = 1 - 8c_1$, $c_1 = -1/12$. Der fermionische Teil der Wirkung ist die unverbesserte Wilson-Wirkung mit der Fermion-Matrix

$$Q[y, x, U] = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} \left[\delta_{x+\hat{\mu},y} U_{\mu}(x) [1 - \gamma_{\mu}] + \delta_{x-\hat{\mu},y} U_{\mu}(x - \hat{\mu})^{\dagger} [1 + \gamma_{\mu}] \right],$$

wobei κ der übliche Hopping-Parameter ist.

5.2.2 Algorithmus

Für die Erzeugung der Eichkonfigurationen wird der *polynomial Hybrid-Monte-Carlo* (PHMC) Algorithmus verwendet, da dieser gerade für eine ungerade Anzahl von Fermionen gut geeignet ist. Dieser Algorithmus basiert auf einer Mehrschritt-Approximation der inversen Fermionmatrix durch Polynome mit stochastischen Korrekturen. Die Polynome wie auch der stochastische Term werden mittels eines *two-step-multi-boson*-Algorithmus erzeugt.

Die Eigenwerte von $(\gamma_5 Q[U])^2$ liegen für typische Eichkonfigurationen in einem bestimmten Intervall \mathcal{I} , in dem die polynomiale Approximation gut funktioniert. In außergewöhnlichen Konfigurationen können die kleinsten Eigenwerte aber auch unterhalb der unteren Grenze von \mathcal{I} liegen. Um diese Unzulänglichkeit zu beseitigen, wird solchen Konfigurationen ein Korrekturfaktor $C[U]$ zugeordnet. Dieser bestimmt sich u. a. aus den Eigenwerten und den approximierten Polynomen. Neben diesem Korrekturfaktor muss außerdem das Vorzeichen $\sigma[U]$ der Fermion-Determinante berücksichtigt werden. Für eine Observable O ist der Erwartungswert dann i. Allg. durch

$$\langle O \rangle = \frac{\int d[U] \sigma[U] C[U] A[U]}{\int d[U] \sigma[U] C[U]}$$

gegeben. Es wird deutlich, dass starke Fluktuationen des Vorzeichens zu kleinen Integralen im Zähler und Nenner führen können und damit die statistische Genauigkeit beeinflussen. Dieses Vorzeichen-Problem ist bei kleinen Quarkmassen ziemlich groß und die Bestimmung des korrekten Vorzeichens in dieser Situation sehr wichtig. Auch viele kleine Korrekturfaktoren können die Statistik negativ beeinflussen.

Um das Vorzeichen der Konfigurationen zu bestimmen werden zwei unterschiedliche Methoden angewandt: zum einen die *spectral-flow*-Methode und zum anderen der *Arnoldi*-Algorithmus. Man untersucht zur Überprüfung alle Konfigurationen, deren kleinsten Eigenwerte unterhalb von \mathcal{I} liegen. Zusätzlich werden auch die umliegenden Konfigurationen und zufällige Stichproben betrachtet.

5.2.3 „Partially Quenched“-Erweiterung

Wie bereits erläutert, gibt es in der Ein-Flavour-QCD nur die $U(1)$ -Quarkzahl-Symmetrie. Es gibt somit insbesondere keine spontane Symmetriebrechung und damit weder Goldstone-Bosonen und noch eine sinnvolle Definition der Quarkmasse. In der Gittertheorie gibt es aber mit dem *partially quenching* die Möglichkeit, die Symmetrie künstlich zu erweitern, siehe Abschnitt 2.7. So können der Theorie zu dem vorhandenen Seequark zusätzliche Valenzquarks hinzugefügt werden. Diese werden nicht in der Boltzmann-Gewichtung der Eichkonfigurationen berücksichtigt. Im Prinzip ist die Anzahl der Valenzquarks beliebig und auch die Massen können, eingeschränkt durch die Forderung nach positiver Definitheit, frei gewählt werden.

Um der Situation der Ein-Flavour-QCD möglichst nahe zu bleiben, haben die zusätzlichen Valenzquarks dieselbe Masse wie das Seequark:

$$m_V = m_S .$$

Diese Wahl ist aus der Sicht des *partially quenching* sicherlich ungewöhnlich, da in der Regel deutlich leichtere Valenzquarks verwendet werden und mit schwereren Seequarks die Geschwindigkeit der Algorithmen erhöht wird [34]. Dieser Aspekt steht hier aber nicht im Vordergrund.

In Anlehnung an die Situation in der Natur werden zwei Valenzquarks mit den Bezeichnungen „ u “ und „ d “ hinzugefügt und das Seequark s kann entweder als *sea*- oder als „*strange*“-Quark aufgefasst werden. Nach der Analyse in Abschnitt 2.7 liegt somit im chiralen Grenzfall eine $SU(3|2) \times SU(3|2)$ Symmetrie vor, die spontan zu einer $SU(3|2)$ -Symmetrie gebrochen wird. Da die See- und Valenzquarkmassen entartet sind, wird die Symmetriegruppe nicht explizit zur $SU(2|2)$ heruntergebrochen. Damit verbleibt im gemeinsamen See- und Valenzsektor eine exakte $SU(3)$ -Symmetrie.

Aufgrund dieser Symmetrie existiert z. B. in diesem gemeinsamen Sektor ein vollständig entartetes pseudoskalares Mesonen-Oktett ϕ_a . Diese Bosonen sind aber keine Teilchen der „physikalischen“ $N_f = 1$ Theorie. Dennoch sind ihre Eigenschaften wie Massen oder Zerfallskonstanten auf dem Gitter eindeutig definierte Größen. Das Gleiche gilt auch für die PCAC-Quarkmasse: Mittels der Divergenz des Axialvektorstroms A_μ und der pseudoskalaren Dichte P ist diese z. B. durch

$$am_{\text{PCAC}} = \frac{\langle \partial_\mu A_\mu^+(x) P^-(y) \rangle}{\langle P^+(x) P^-(y) \rangle}$$

definiert. Aufgrund der exakten $SU(3)$ -Symmetrie kann die PCAC-Quarkmasse multiplikativ renormiert werden. Mit den Renormierungskonstanten für den Axialstrom und die pseudoskalare Dichte ist die renormierte PCAC-Quarkmasse durch

$$m_{\text{PCAC}}^{\text{ren}} = \frac{Z_A}{Z_P} m_{\text{PCAC}}$$

in bekannter Form definiert.

Durch eine angemessene Einstellung der nackten Quarkmasse auf dem Gitter sollten sowohl die Massen der Valenzmesonen als auch die über die Ströme definierte PCAC-Quarkmasse zum Verschwinden gebracht werden, wie man es aus der herkömmlichen QCD kennt. Dieses Verhalten wird auch durch die bisherigen Resultate bestätigt, siehe Abschnitt 5.5.

	L/a	β	κ	N_{conf}	plaquette	τ_{plaq}	r_0/a
a	12	3,80	0,1700	5424	0,546041(66)	12,5	2,66(4)
b	12	3,80	0,1705	3403	0,546881(46)	4,6	2,67(5)
c	12	3,80	0,1710	2884	0,547840(67)	7,6	2,69(5)
A	16	4,00	0,1600	1201	0,581427(36)	4,3	3,56(5)
B	16	4,00	0,1610	1035	0,582273(36)	4,1	3,61(5)
C	16	4,00	0,1615	1005	0,582781(32)	3,3	3,73(5)
\bar{A}	16	4,00	0,1440	5600	0,577978(23)	9,7	3,74(3)
\bar{B}	16	4,00	0,1443	5700	0,578167(28)	11,3	3,83(5)
\bar{B}_{24}	24	4,00	0,1443	3900	0,578182(10)	5,8	3,83(4)

Tab. 5.1: Übersicht der Runs, mit denen das Hadron-Spektrum untersucht wird. Die Werte von r_0/a werden im Folgenden benutzt, um über die Festlegung $2r_0 = 1$ fm in physikalische Einheiten umzurechnen.

5.3 Resultate

5.3.1 Runs

Die drei Runs a , b , c sind auf einem kleinen Gitter $L/a = 12$, $\beta = 3,80$ durchgeführt worden. Die jeweiligen κ -Werte sind zusammen mit weiteren spezifischen Eigenschaften in Tab. 5.1 aufgelistet. Mit den Läufen A , B , C gibt es drei weitere auf einem größeren Gitter $L/a = 16$ bei $\beta = 4,00$. Mit der Zielsetzung, die Zahl von außergewöhnlichen Konfigurationen zu verkleinern, ist in den zuletzt aufgelisteten Runs \bar{A} , \bar{B} , \bar{B}_{24} *stout smearing* benutzt worden [67].

Das Stout-Smearing ist eine iterative Verbreiterung der Eich-Links: Der $(n+1)$ -te Schritt wird aus dem vorherigen durch

$$U_{\mu}^{(n+1)}(x) = e^{iQ_{\mu}^{(n)}(x)} U_{\mu}^{(n)}(x)$$

gewonnen, dabei ist $U_{\mu}^{(0)}(x)$ der unverwischte oder auch „dünne“ Link; der maximal verwischte Link wird als „dick“ bezeichnet. $Q_{\mu}^{(n)}(x)$ ist eine spurlose, hermitesche $SU(3)$ -Matrix, die bei drei Quarkfarben durch

$$Q_{\mu}(x) = \frac{i}{2} \left[U_{\mu}(x) C_{\mu}^{\dagger}(x) - C_{\mu}(x) U_{\mu}^{\dagger}(x) \right] - \frac{i}{6} \text{Tr} \left[U_{\mu}(x) C_{\mu}^{\dagger}(x) - C_{\mu}(x) U_{\mu}^{\dagger}(x) \right]$$

definiert ist. Hier sind die $C_{\mu}^{(n)}(x)$ gewichtete Heftklammer-förmige Link-Verbindungen

$$C_{\mu}(x) = \rho_{\mu\nu} \sum_{\nu \neq \mu} \left[U_{\nu}(x) U_{\mu}(x + \hat{\nu}) U_{\nu}^{\dagger}(x + \hat{\mu}) + U_{\nu}^{\dagger}(x - \hat{\nu}) U_{\mu}(x - \hat{\nu}) U_{\nu}^{\dagger}(x - \hat{\nu} + \hat{\mu}) \right],$$

	am_{η_s}	am_{σ_s}	am_{Δ_s}
a	0,462(13)	0,660(39)	1,215(20)
b	0,403(11)	0,629(29)	1,116(38)
c	0,398(28)	0,584(55)	1,204(57)
A	0,455(17)	0,607(57)	1,006(15)
B	0,380(18)	0,554(52)	0,960(15)
C	0,344(21)	0,576(53)	0,971(30)
\bar{A}	0,347(16)	0,538(41)	0,855(50)
\bar{B}	0,286(18)	0,485(46)	0,848(70)
\bar{B}_{24}	0,261(11)	0,496(22)	0,900(24)

Tab. 5.2: Hadron-Observablen aus dem physikalischen Sektor der Ein-Flavour-QCD. Die entsprechenden Zustände in der Natur heißen von links nach rechts $\eta'(958)$, $f_0(600)$ und $\Delta(1232)^{++}$ (bzw. Ω^-).

$\rho_{\mu\nu}$ ist die Smearing-Matrix. In der reinen Eichwirkung werden die dünnen Links verwendet, in der Fermionwirkung die dicken. Damit kann das Smearing als eine spezielle Diskretisierung der kovarianten Ableitung D_μ aufgefasst werden. In den Simulationen wird eine konstante Gewichtung $\rho = 0,15$ verwendet.

5.3.2 Spektrum

Bei den Mesonen sind die einfachsten Operatoren mit den Quantenzahlen J^P im pseudoskalaren und skalaren Sektor

$$\begin{aligned} 0^+ : P(x) &= \bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x), \\ 0^- : S(x) &= \bar{\psi}(x)\psi(x). \end{aligned}$$

Diese Zustände werden mit η_s und σ_s bezeichnet, um mit dem Index s eindeutig zu kennzeichnen, dass es sich um physikalische Zustände mit dem *sea*-Quark handelt. Die entsprechenden Zustände in der gewöhnlichen QCD heißen $\eta'(958)$ und $\sigma = f_0(600)$. Im Gegensatz zum Ein-Quark-Zustand in der Ein-Flavour-QCD ist das η' -Meson in der Natur eine Überlagerung von $|\bar{u}u\rangle$, $|\bar{d}d\rangle$, $|\bar{s}s\rangle$.

Im Baryonensektor ist das einfachste Feld, das aus einem Quarkflavour zusammengesetzt werden kann,

$$\Delta_i = \varepsilon^{abc} [\psi_a(x)^\top C \gamma_i \psi_b(x)] \psi_c(x).$$

Da das Spin- $\frac{3}{2}$ -Teilchen analysiert wird, muss dieses aus dem Operator herausprojiziert wer-

	am_{PCAC}	am_{π}	af_{π}	am_N
a	0,0277(5)	0,3908(24)	0,1838(11)	1,044(5)
b	0,0195(4)	0,3292(25)	0,1730(15)	0,956(3)
c	0,0108(12)	0,253(10)	0,156(10)	1,01(5)
A	0,04290(36)	0,4132(21)	0,1449(9)	0,902(4)
B	0,02561(31)	0,3199(22)	0,1289(10)	0,798(5)
C	0,01681(33)	0,2622(19)	0,1190(17)	0,762(9)
\bar{A}	0,01651(27)	0,2471(19)	0,0983(20)	0,733(13)
\bar{B}	0,01094(23)	0,2028(35)	0,0913(24)	0,670(20)
\bar{B}_{24}	0,01047(17)	0,1958(15)	0,0920(11)	0,672(10)

Tab. 5.3: Hadronische Observablen aus dem Valenzsektor: Hierbei handelt es sich um unphysikalische Zustände, die auf dem Gitter allerdings wohldefiniert sind.

den, weil das Feld auch eine Spin- $\frac{1}{2}$ -Komponente enthält. Der zugehörige Projektor ist

$$G_{\frac{3}{2}}(t) = \frac{1}{6} \text{Tr} (G_{ij}(t) \gamma_i \gamma_j + G_{jj}(t))$$

mit dem Korrelator

$$G_{ij}(t) = \sum_{\vec{x}} \langle \Delta_i(x) \bar{\Delta}_j(0) \rangle.$$

Die Parität des energetisch niedrigsten Zustands Δ_s ist positiv, so dass er durch $\frac{3}{2}^+$ charakterisiert ist. Wenn man das s -Quark als up -Quark der QCD interpretiert, entspricht dieser herausprojizierte Zustand dem $\Delta(1232)^{++}$. Nimmt man das schwerere s -Quark zum Vergleich mit der Natur, dann ist Ω^- das korrespondierende Baryon.

Die Resultate für die Mesonen η_s und σ_s sowie des Baryons Δ_s sind in Tab. 5.2 aufgelistet und in Abb. 5.2 dargestellt. Eine genauere Analyse mit chiraler Störungstheorie erfolgt in Abschnitt 5.5.

Valenzsektor

Unter dem Gesichtspunkt der *partially quenched* erweiterten Theorie lässt sich auch der Valenzsektor analysieren. Die Beiträge zum Mesonenkorrelator können als Nicht-Singulett aus Valenzquarks konstruiert werden. Genauso kann auch im Baryonensektor ein Valenz-Nukleon definiert werden. Die Ergebnisse des Valenzsektors sind in Tab. 5.3 aufgelistet.

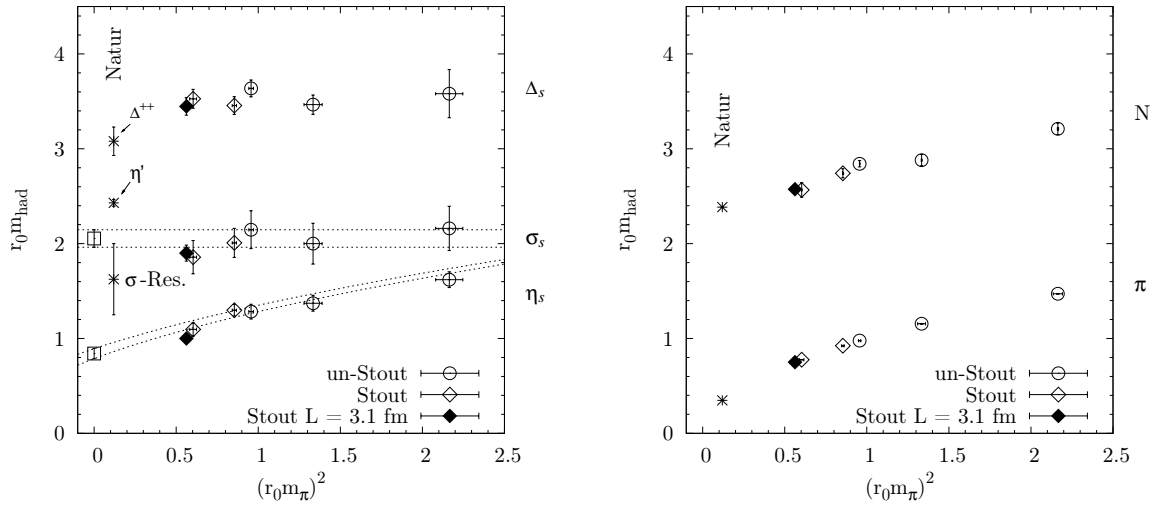


Abb. 5.2: Das Hadron-Spektrum in Einheiten des Sommerparameters r_0 bei $\beta = 4,0$. Die Massen sind als Funktion der quadratischen Pionmasse $(r_0 m_\pi)^2$ aufgetragen.

Das physikalische Spektrum der Ein-Flavour-Theorie und die zusätzlichen Teilchen aus dem Valenzsektor sind in Abb. 5.2 dargestellt.

5.3.3 Glueball

In der Ein-Flavour-Theorie können auch rein gluonische Operatoren für Spin-0-Zustände konstruiert werden, welche in der gewöhnlichen QCD als Gluebälle bezeichnet werden. Auch für den Vergleich mit dem supersymmetrischen Spektrum sind die Eigenschaften der Gluebälle interessant, da sich gluonische Operatoren aufgrund der zu Grunde liegenden Wirkung besonders gut vergleichen lassen. Leider liegt es in der Natur dieser speziellen Zustände, dass sie ein miserables Signal-Rausch-Verhältnis aufweisen. Von besonderem Interesse ist der 0^{++} -Glueball, der die gleichen Quantenzahlen wie das σ_s -Meson aufweist und deswegen eine vergleichbare Masse haben sollte und außerdem prinzipiell mit diesem mischen könnte.

Der Glueball kann auf dem Gitter durch Messungen einzelner räumlicher Plaquetten bestimmt werden. Um die Masse des niedrigsten Zustandes zu bestimmen, muss die Analyse auf großen Zeitscheiben durchgeführt werden, auf denen die angeregten Zustände bereits ausreichend unterdrückt sind. Deswegen wird APE-Smearing verwendet, um das Glueball-Signal auf diesen Zeitscheiben zu verbessern. Beim APE-Smearing werden die Operatoren iterativ verwischt. Um das bestmögliche Signal zu extrahieren, wird der verwischte Operator nach verschiedenen Stufen gemessen. Die einzelnen Stufen sind untereinander korreliert und die Eigenwerte können effizient durch eine variierte Diagonalisierung bestimmt werden.

Variationsmethoden

I. Allg. kann man die Matrix $C_{ij}(t)$ nicht für ein t diagonalisieren und davon ausgehen, dass die Eigenvektoren dann auch für die anderen t eine ausreichend gute Eigenbasis sind, wenn diese zeitlich weit auseinander liegen. Einen Ansatz zur Lösung dieses Problems bietet das *verallgemeinerte Eigenwert-Problem*, das im konkreten Fall

$$C_{ij}(t_1)u_j^\alpha = \lambda^\alpha C_{ij}(t_0)u_j^\alpha$$

lautet; die Eigenwerte sind $\lambda^\alpha \sim e^{-m_\alpha(t_1-t_0)}$. Diese Variations-Eigenvektoren benutzt man nun für die neue Basis, bei der

$$\bar{C}_{\alpha\beta}(t) = u_i^\alpha C_{ij}(t)u_j^\beta$$

zu den Zeiten t_1 und t_0 diagonal ist. Diese Variationsmethode kann dazu benutzt werden, um eine Basis bei kleinem t , d. h. geringerem Rauschen zu nehmen, um dann die t -Abhängigkeit von $\bar{C}_{\alpha\beta}(t)$ für größere t zu untersuchen. Damit kann dann insbesondere das asymptotische Verhalten des Grundzustandes $\bar{C}_{00}(t)$ besser bestimmt werden.

Analyse

Für die Analyse des 0^{++} -Glueballs habe ich fünf APE-Schritte mit der äquidistanten Schrittweite von zwei gemessen, um ein besseres Signal-Rausch-Verhältnis zu bekommen. Der von mir verwendete Smearing-Parameter beträgt in jedem Schritt $\varepsilon_{\text{APE}} = 0,2$.

Für die Runs a, b, c ist es nicht möglich, ein vertrauenswürdiges Ergebnis für die Glueballmassen zu extrahieren, da (a) in stabilen Fits die Zeitscheibe $t = 2$ berücksichtigt werden muss und (b) schon ab $t = 4 - 5$ starke Fluktuationen auftreten. Trotzdem liegen die extrahierten Massen zumindest in zwei Punkten nahe der σ_s -Masse:

Run	a	b	c
am_{σ_s}	0,660(39)	0,629(29)	0,584(55)
$am_{0^{++}}$	0,777(11)	0,685(10)	0,842(16)

Aufgrund der geringeren Statistik sieht es bei den Läufen A, B, C noch schlechter aus. Die auf den kleinen Zeitscheiben gemessenen Gluonmassen haben Werte von $am_{0^{++}} \approx 1.0$, was ein deutliches Zeichen für Kontaminationen von angeregten Zuständen ist.

Bei den Stout-Runs \bar{A} und \bar{B} ist die Situation dagegen besser. Dies liegt zum einen an der guten Statistik und an der Gittergröße, aber zum anderen wirkt sich das Stout-Smearing auch stabilisierend auf die rein gluonische Messung aus. In diesen Läufen ist es möglich, die Gluonmasse für größere t zu fitten. In Abb. 5.3 sind die effektiven Massen für die relevanten Zeitscheiben dargestellt.

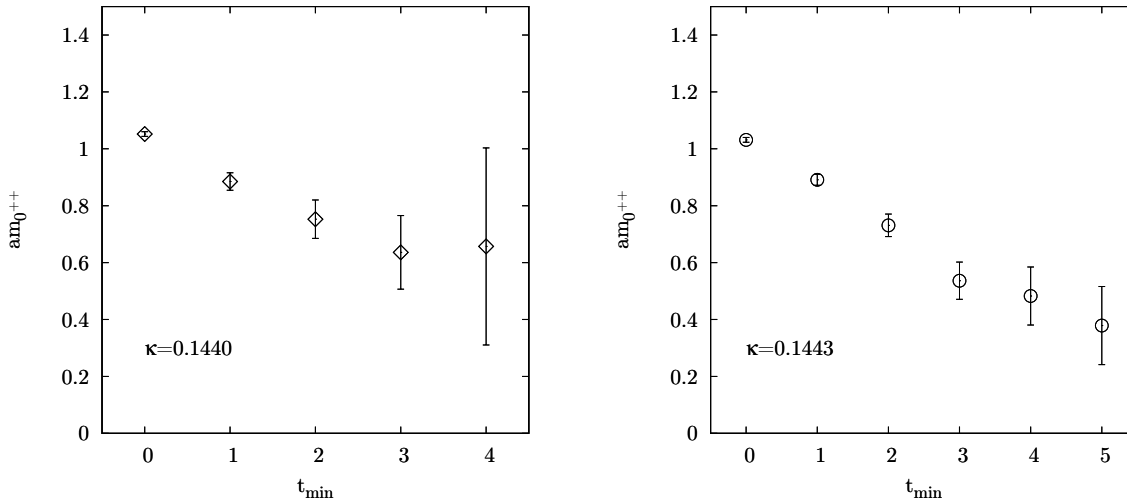


Abb. 5.3: Effektive Massen der Gluebälle der Stout-Runs \bar{A} bei $\kappa = 0.1440$ und \bar{B} bei $\kappa = 0.1443$. Auf der y -Achse sind die effektiven Massen samt Fehler eingezeichnet, die zwischen den Zeitscheiben t_{\min} und $t_{\min} + 1$ ermittelt worden sind.

Die innerhalb des Plateaus gefitteten Massen sind

$$\begin{aligned} \bar{A} : \quad am_{0^{++}} &= 0,64(9), \\ \bar{B} : \quad am_{0^{++}} &= 0,52(7) \end{aligned}$$

und durchaus vertrauenswürdig. Hinzu kommt, dass sie mit den σ_s -Massen 0,54(4) für \bar{A} und 0,49(5) für \bar{B} konsistent sind.

Die in der supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie gemessenen Glueballmassen [69, 70] passen gut zu den hier bestimmten Werten. Dieses zeigt eine Ähnlichkeit des Spektrums beider Theorien im gluonischen Sektor.

5.4 PQ χ PT für Ein-Flavour-QCD

Der „Partially Quenched“-Gesichtspunkt spielt in den Überlegungen eine wichtige Rolle. Deswegen ist es von Interesse zu überprüfen, ob die Vorhersagen dieser Theorie gut mit den vorliegenden Daten übereinstimmen. Dafür nutze ich die in Abschnitt 2.7 vorgestellte partiell gequenchte Störungstheorie (PQ χ PT), um den Zusammenhang der Messdaten zu klären.

Um die Situation zu überprüfen, werden im Folgenden die Fälle mit einem und zwei Valenzquarks ($N_V = 1, 2$) untersucht, also SU(2|1) und SU(3|2). Man erwartet, dass SU($N_V + N|N_V$) bei festem N Teilchen mit gleichen Eigenschaften beschreibt [36]. Zur Kontrolle werden die

Massen in beiden Modellen bestimmt. Somit nähert man sich ausgehend von der Ein-Flavour-QCD in zwei Schritten der $SU(3|2)$. Die Rechnungen führe ich zunächst in allgemeiner PQ χ PT durch und reduziere sie schließlich auf den für die Analyse relevanten Fall.

5.4.1 Massen in führender Ordnung

SU(2|1)

Die vier benötigten Generatoren sind durch die Matrizen

$$\left(\begin{array}{c|c} \tau_i & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right), \quad i = 1, 2, 3 \quad \text{und} \quad \tau_D = \left(\begin{array}{c|c} \mathbb{1} & 0 \\ \hline 0 & 2 \end{array} \right)$$

gegeben. Für die Notation in den Massenformeln werden zudem die Bezeichnungen

$$\chi_{VS} = \frac{\chi_S + \chi_V}{2} \quad \text{und} \quad \chi_3 = \frac{\chi_S - \chi_V}{2}$$

eingeführt. Die Massenmatrix lässt sich mittels der Generatoren als

$$\begin{aligned} \chi &= \chi_S \mathbb{1} - \chi_3 \tau_3 - \chi_3 \tau_D \\ &= \text{diag}(\chi_V, \chi_S, \chi_V) \end{aligned}$$

schreiben, die Gittermatrix ist einfach

$$\rho = \rho_0 \mathbb{1}.$$

Für die Flavour-geladenen „Pionen“ erhält man direkt

$$m_{VS}^2 = m_\pi^2 = \chi_{VS} + \rho_0.$$

Die Massenmatrix der Flavour-neutralen Bosonen π_0 und D ist nicht diagonal, die entsprechende Untermatrix lautet:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \chi_V + \chi_S & i(\chi_S - \chi_V) \\ i(\chi_S - \chi_V) & 3\chi_V - \chi_S \end{pmatrix}.$$

Die Ungleichung für positive Definitheit des Realteils $\chi_S < 3\chi_V$ ist konsistent mit der Bedingung (39) aus [36].

Diese Matrix lässt sich durch eine Ähnlichkeitstransformation nicht diagonalisieren. Die Eigenwerte entsprechen den Polstellen des Propagators, man erhält

$$m_{\pi^0}^2 = m_D^2 = \chi_V + \rho_0.$$

SU(3|2)

Mit den üblichen Gell-Mann-Matrizen der SU(3) sind die Generatoren

$$\left(\begin{array}{c|c} \lambda_a & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right), \quad a = 1, \dots, 8, \quad \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & \tilde{\tau}_i \end{array} \right), \quad i = 1, 2, 3 \quad \text{und} \quad \lambda_D = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\begin{array}{c|c} 2 \cdot \mathbf{1} & 0 \\ \hline 0 & 3 \cdot \mathbf{1} \end{array} \right).$$

Mit ihnen lässt sich die Massenmatrix

$$\begin{aligned} \chi &= \chi_S \mathbf{1} - \frac{2}{\sqrt{3}} \chi_3 \lambda_8 - \frac{2}{\sqrt{3}} \chi_3 \lambda_D \\ &= \text{diag}(\chi_V, \chi_V, \chi_S, \chi_V, \chi_V) \end{aligned}$$

definieren. Man erhält für die „Pionen“ und „Kaonen“ dieser Variante

$$\begin{aligned} m_{VS}^2 &= m_\pi^2 = \chi_V + \rho_0, \\ m_{VV}^2 &= m_K^2 = \chi_{VS} + \rho_0 \end{aligned}$$

und auch hier stellt sich heraus, dass die Massenmatrix für die Flavour-neutralen η und D nicht diagonal ist:

$$\frac{1}{3} \begin{pmatrix} \chi_V + 2\chi_S & i(2\chi_S - 2\chi_V) \\ i(2\chi_S - 2\chi_V) & 5\chi_V - 2\chi_S \end{pmatrix}.$$

Die Ungleichung $\chi_S < 5/2 \chi_V$ für positive Definitheit des Realteiles ist ebenfalls konsistent mit der Bedingung (39) aus [36]. Die Polstellen bzw. Massen der beiden Mesonen sind

$$m_\eta^2 = m_D^2 = \chi_V + \rho_0.$$

Ergebnis

In beiden Fällen gibt es Mesonen, die sich aus einem Valenz- und einem Seequark zusammensetzen. In der SU(2|1) sind das die geladenen Pionen und in der SU(3|2) die Kaonen; sie haben die Massen

$$m_{VS}^2 = \chi_{VS} + \rho_0.$$

Außerdem hat man jeweils das Flavour-neutrale Teilchen D mit der Masse

$$m_D^2 = \chi_V + \rho_0.$$

Im Modell der Symmetriegruppe SU(3|2) gibt es zusätzlich reine Valenz-Mesonen mit der Masse

$$m_{VV}^2 = \chi_V + \rho_0.$$

Flavour-Singulett η_s

Das η_s ist schwerer als die Goldstone-Bosonen und hat im chiralen Limes aufgrund der Anomalie eine endliche Masse; in der gewöhnlichen Störungstheorie ist deswegen ausintegriert. In Abschnitt 2.7.2 auf S. 39 wurde gezeigt, dass die Lagrangedichte um die Terme

$$\frac{\alpha}{2} (\partial_\mu \Phi_0)^2 + \frac{m_{\Phi_0}^2}{2} \Phi_0^2$$

erweitert werden muss, um das Feld miteinzubeziehen. Dann hat die nicht-diagonale neutrale Massenmatrix der Felder einen zusätzlichen Rang. Neben den zwei bekannten Polstellen $m_D^2 = \chi_V + \rho_0$ bekommt man einen weiteren Pol bei

$$m_{\eta_s}^2 = \frac{m_{\Phi_0}^2 + \chi_S + \rho_0}{1 + \alpha};$$

für $\chi_V = \chi_S$ also

$$m_{\eta_s}^2 = \frac{m_{\Phi_0}^2 + m_\pi^2}{1 + \alpha}. \quad (5.2)$$

Dieses Ergebnis für SU(2|1) und SU(3|2) steht im Einklang mit den Ergebnissen in [36, 37].

5.4.2 Ergebnisse in NLO

Schon in führender Ordnung wird deutlich, dass die Massen der Flavour-neutralen Mesonen nur mit größerem Aufwand zu bestimmen sind. Diese werden nicht für die Auswertung der Simulation benötigt und deswegen hier nicht betrachtet. Des Weiteren sind die Ergebnisse wie erwartet für m_{VS}^2 in SU(2|1) und SU(3|2) identisch. In beiden Fällen bekommt man aus der Analyse in nächstführender Ordnung

$$\begin{aligned} M_{VS}^2 &= m_{VS}^2 \left[1 + \frac{m_{VV}^2}{16\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_{VV}^2}{\Lambda^2} \right) \right] \\ &+ \frac{8}{F_0^2} \chi_{VS} [(2L_8 - L_5)\chi_{VS} + (2L_6 - L_4)\chi_S] \\ &+ \frac{8}{F_0^2} \rho_0 [(2W_8 + W_6 - W_5 - W_4 - L_5)\chi_{VS} + (W_6 - L_4)\chi_S]. \end{aligned}$$

In dem verwendeten Modell SU(3|2) gibt es zudem reine Valenzmesonen mit der Masse

$$\begin{aligned} M_{VV}^2 &= m_{VV}^2 \left[1 + \frac{2\chi_V - \chi_S + \rho}{16\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_{VV}^2}{\Lambda^2} \right) + \chi_V - \chi_S \right] \\ &+ \frac{8}{F_0^2} \chi_V [(2L_8 - L_5)\chi_V + (2L_6 - L_4)\chi_S] \\ &+ \frac{8}{F_0^2} \rho_0 [(2W_8 + W_6 - W_5 - W_4 - L_5)\chi_V + (W_6 - L_4)\chi_S]. \end{aligned}$$

In dem für die Auswertung interessanten Spezialfall $\chi_0 = \chi_V = \chi_S$ stimmen beide Massen überein und zwar

$$M_\pi^2 = m_\pi^2 \left[1 + \frac{m_\pi^2}{16\pi^2 F_0^2 N_f} \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) \right] + \frac{8}{F_0^2} [(2L_{86} - L_{54})\chi_0^2 + (2W_{86} - W_{54} - L_{54})\chi_0\rho_0]$$

mit den Abkürzungen

$$m_\pi^2 = \chi_0 + \rho_0, \quad L_{ij} = L_i + N_f L_j, \quad W_{ij} = W_i + N_f W_j.$$

Damit hat diese Masse formal dieselbe Gestalt wie die Pionmasse in SU(2) und SU(3) bei vollkommen entarteten Quarkmassen.

Zerfallskonstanten

Für die Analyse wird außerdem die Relation der Zerfallskonstanten und der Quarkmassen benötigt. Im Spezialfall $\chi_0 = \chi_V = \chi_S$ bekommt man für alle Zustände den gleichen Ausdruck

$$F_\pi = F_0 \left[1 - \frac{N_f m_\pi^2}{32\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{m_\pi^2}{\Lambda^2} \right) \right] + \frac{4}{F_0} [L_{54}\chi_0 + W_{54}\rho_0]$$

der sich formal ebenfalls wie in SU(2) und SU(3) bei entarteten Quarkmassen darstellt.

5.5 „Partially Quenched“-Analyse

Mit den hergeleiteten Formeln fitte ich in diesem Abschnitt die Messdaten, um die Eigenschaften der Valenzmesonen zu analysieren. Dazu werden $(am_\pi)^2$ und af_π als Funktion der PCAC-Quarkmasse am_{PCAC} betrachtet. Aufgrund der wenigen Datenpunkte auf den einzelnen Gittern ist eine Analyse der Gitterartefakte oder *finite-size*-Effekte nicht möglich. Außerdem wird die leichte β -Abhängigkeit der Renormierungskonstanten Z_A und Z_P vernachlässigt.

Die Kontinuum-Formeln lassen sich durch die in der QCD üblichen *universellen Niedrig-Energieskalen* Λ_3 und Λ_4 ausdrücken, wobei in Ein-Flavour-QCD

$$\begin{aligned} \Lambda_3 &= 4\pi F_0 \exp(64\pi^2[L_4 + L_5 - 2L_6 - 2L_8]), \\ \Lambda_4 &= 4\pi F_0 \exp(64\pi^2[L_4 + L_5]) \end{aligned}$$

sind, vgl. auch Gl. (2.11) auf S. 30.

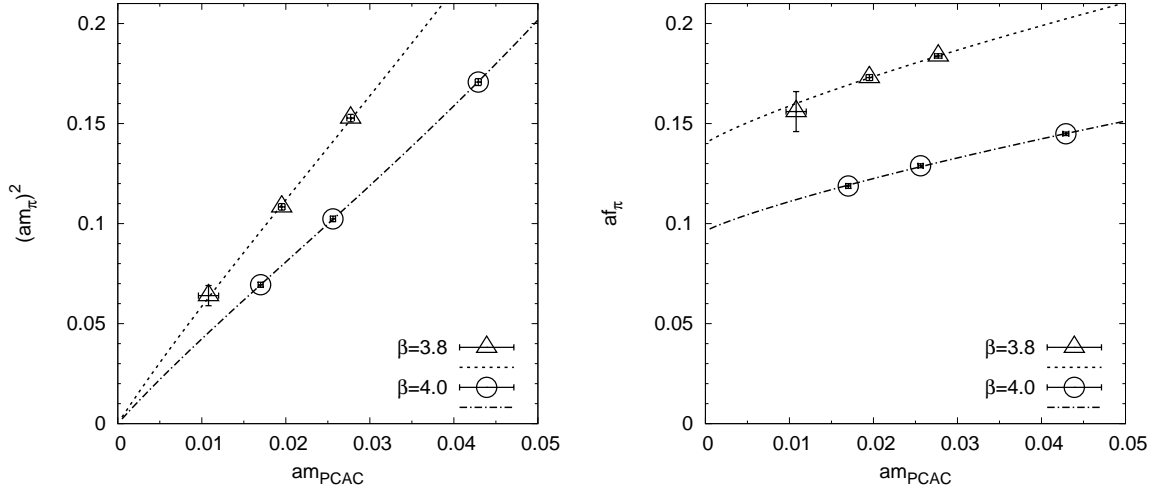


Abb. 5.4: Fit und Daten der Runs ohne Stout-Smearing: a , b und c bei $\beta = 3,8$ sowie A , B und C bei $\beta = 4,0$.

Berücksichtigt man die Renormierung der Ströme und die Normierung $\sqrt{2}F_0 \approx f_\pi$ bei ungefähr 130 MeV, dann erfüllt die Masse die Relation

$$m_\pi^2 = \chi_{\text{PCAC}} + \frac{\chi_{\text{PCAC}}^2}{16\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{\chi_{\text{PCAC}}}{\Lambda_3^2} \right)$$

als Funktion der PCAC-Quarkmasse und die Zerfallskonstante

$$\frac{Z_A f_\pi}{\sqrt{2}F_0} = 1 - \frac{\chi_{\text{PCAC}}}{16\pi^2 F_0^2} \ln \left(\frac{\chi_{\text{PCAC}}}{\Lambda_4^2} \right).$$

Da alle Komponenten fehlerbehaftet sind, wird die in Abschnitt 2.8 vorgestellte Methode für den Fit benutzt. Aufgrund der Freiheitsgrade werden in den Fit nur die β 's mit einbezogen, bei denen drei Datensätze vorliegen. Der Fit ist samt der Daten in Abb. 5.4 geplottet. Die Messdaten sind qualitativ mit den Vorhersagen der PQ χ PT sehr gut im Einklang. Für quantitativ gesicherte Aussagen ist dieser Fit wegen der Datenmenge und der Messfehler nicht geeignet.

5.5.1 Verhältnis-Fits

Aufgrund des universellen Charakters von Λ_3 und Λ_4 in der QCD ist aber eine möglichst genaue Bestimmung zumindest dieser beiden Größen interessant, um einen Vergleich mit der gewöhnlichen QCD zu ziehen. Damit der Fit in Bezug auf diese beiden Größen optimiert wird, führe ich sogenannte Verhältnis-Fits durch. Dazu wird ein Datensatz als Referenz herausgenommen und die Verhältnisse der anderen Messpunkte zum Referenzpunkt werden gefittet.

Mit der Abkürzung

$$\sigma = \frac{\chi_{\text{PCAC}}}{\chi_{\text{PCAC,ref}}}$$

haben die resultierenden Fitformeln

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} \frac{m_\pi^2}{m_{\pi,\text{ref}}^2} &= 1 + \zeta \frac{\sigma - 1}{16\pi^2} \ln \left(\zeta / \frac{\Lambda_3^2}{F_0^2} \right) + \zeta \frac{\sigma}{16\pi^2} \ln \sigma, \\ \frac{f_\pi}{f_{\pi,\text{ref}}} &= 1 - \zeta \frac{\sigma - 1}{32\pi^2} \ln \left(\zeta / \frac{\Lambda_4^2}{F_0^2} \right) - \zeta \frac{\sigma}{32\pi^2} \ln \sigma \end{aligned}$$

mehr Freiheitsgrade, da neben den universellen Niedrig-Energieskalen nur der dimensionslose Fitparameter $\zeta = \zeta_{\text{ref}}$ anstelle von B_0 , Z_A und F_0 benötigt wird.

Für $\beta = 4.0$ und dem Datensatz bei $\kappa = 0.1615$ als Referenz ist das Ergebnis dieses Fits

$$\begin{aligned} \frac{\Lambda_3}{F_0} &= 10,0 \pm 2,6, \\ \frac{\Lambda_4}{F_0} &= 31,5 \pm 14,3, \end{aligned}$$

was kompatibel mit den Werten der gewöhnlichen QCD ist [71].

5.5.2 Pion-Eta-Fit

Außerdem kann auch ein gleichzeitiger Fit der Pion- und η -Masse durchgeführt werden, um zu dem Punkt zu extrapolieren, bei dem die η -Masse möglicherweise verschwindet. Dieser Punkt ist deswegen interessant, weil er möglicherweise den Bereich aufzeigt, in dem die spontante CP -Verletzung auftritt [56, 57, 58, 59]. Mein simultaner Fit

$$m_{\eta_s}^2 = \frac{m_\Phi^2 + m_\pi^2}{1 + \alpha}$$

liefert

$$\alpha = -0.03(19), \quad am_\Phi = 0.18(8)$$

bzw. unter der Annahme von $\alpha = 0$

$$am_\Phi = 0.19(2).$$

In physikalischen Einheiten ist $m_\Phi \approx 280$ MeV.

Diese Größe steht in Verbindung zur topologischen Suszeptibilität χ_t . In führender Ordnung einer $1/N_c$ -Entwicklung lautet die Witten-Veneziano-Formel [68, 72]

$$m_{\Phi_0} = \frac{4N_f}{(f_\pi^2)} \chi_t.$$

Mit $\chi_t = [193(9) \text{ MeV}]^4$ aus Ref. [73] ergibt sich unter Verwendung des extrapolierten Wertes für f_π der Wert $m_\Phi \approx 450(170)$ MeV.

Zusammenfassung

Das hadronische Spektrum der Ein-Flavour-QCD ist bestimmt worden. Neben den physikalischen Hadronen können auf dem Gitter aber auch die Eigenschaften weiterer Valenz-Hadronen analysiert werden. Diese können auf dem Gitter im Rahmen der erweiterten *partially quenched* Theorie verstanden werden. Die zugehörige chirale Störungstheorie stützt diese Interpretation und eignet sich für meine Auswertung der Massen und Zerfallskonstanten der Valenz-Mesonen sowie der PCAC-Quarkmasse.

Bei hoher Statistik kann ich im rein gluonischen Sektor durch Verwendung von APE-Smearing und Variationsmethoden die Masse des 0^+ -Glueballs messen. Diese ist konsistent mit den Eigenschaften des Glueballs der supersymmetrischen $\mathcal{N} = 1$ -Yang-Mills-Theorie.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit habe ich aktuelle Simulationen der Gitter-QCD mit Wilson-Quarks und deren Grundlagen dargestellt. Von besonderem Interesse sind dabei die chirale Symmetrie und die darauf aufbauende Störungstheorie. Viele Aspekte dieses Ansatzes werden in der Analyse benötigt und deswegen gesondert betrachtet. Dazu gehören die Twisted-Mass-Formulierung und die $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung, die *partially-quenched*-Erweiterung und die *finite-size*-Effekte.

Die Auswertung des Projekts mit zwei leichten Quarks zeigt, dass es möglich ist, Simulationen mit realistischen Quarkmassen durchzuführen. Meine umfangreichen Analysen mittels chiraler Störungstheorie zeigen zum einen, dass mit Twisted-Mass-Fermionen die Gitterartefakte sehr gering gehalten werden können. Die zu Grunde liegende Einstellung der PCAC-Quarkmasse erweist sich damit als äußerst effektiv. Zum anderen kann durch eine angemessene Berücksichtigung von *finite-size*-Effekten ins unendliche Volumen extrapoliert werden. Damit können insgesamt die fundamentalen Einschränkungen der Gitter-QCD, diskrete Raumzeit und endliches Volumen, sehr gut kontrolliert werden.

In den Untersuchungen der $2 + 1 + 1$ -Flavour-Simulationen wird erstmalig mit einem dynamischen *charm*-Quark das Niederenergie-Spektrum der QCD ausgewertet. Es wird deutlich, dass die Twisted-Mass-QCD auch in diesem Fall erfolgreich verwendet werden kann. Von den Vorteilen der Twisted-Mass-Formulierung kann man auch in dieser Situation profitieren. Insbesondere können die Gitterartefakte ohne zusätzlichen Aufwand wie im Zwei-Flavour-Fall reduziert werden. Das Zusammenspiel der Twistwinkel und der unterschiedlichen Quarkmassen ist von mir mit der chiralen Störungstheorie ausgearbeitet worden. Die Notwendigkeit des zweifach maximalen Twistwinkels für $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung wird in diesem Rahmen gezeigt.

Auch in der unkonventionellen Ein-Flavour-QCD lassen sich Gitter-Simulationen bei relativ kleinen Quarkmassen durchführen. Das von der gewöhnlichen QCD verschiedene Spektrum lässt sich bestimmen. Die grundsätzlichen Schwierigkeiten der Analyse des rein gluonischen Sektors sind von mir gelöst worden und die Vergleichbarkeit mit der supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie ist deutlich geworden. Des Weiteren ist es auf dem Gitter möglich, in der partiell gequenchten Erweiterung der Ein-Flavour-QCD die Eigenschaften künstlicher Valenz-Hadronen zu messen. Dieser Gesichtspunkt wird zudem durch meine Analyse mit chiraler Störungstheorie bestätigt und ist konsistent mit den Ergebnissen der gewöhnlichen QCD. Es bleibt spannend zu sehen, welche endgültigen Feststellungen zur CP -Verletzung gemacht werden.

A Generatoren der $SU(N_f)$

Die N_f -dimensionalen verallgemeinerten Gell-Mann-Matrizen lauten

$$\lambda_{i,j} = \begin{cases} \sigma_{1;i,j}, & i < j, \\ \sigma_{2;i,j}, & i > j, \\ \sigma_{3;i}, & i = j \end{cases}$$

und $i+j > 1$ für alle $N_f > 1$. $\sigma_{1;i,j}$ ist eine Matrix mit zwei nicht verschwindenden Einträgen 1 jeweils in Reihe/Zeile ij und ji , $\sigma_{2;i,j}$ ist die Matrix mit den Einträgen i bei ij und $-i$ bei ji und

$$\sigma_{3;i} = \sqrt{\frac{2}{i(i-1)}} \text{diag}(\underbrace{1, \dots, 1}_{i-1}, 1-i, \underbrace{0, \dots, 0}_{N_f-i}).$$

Mit der Zuordnung

$$\begin{aligned} \lambda_{i,j} &\longrightarrow \lambda_n \\ (i,j) &\longmapsto n = \begin{cases} (j-1)^2 + 2i - 2, & i \leq j, \\ (i-1)^2 + 2j - 1, & i > j \end{cases} \end{aligned}$$

hat man die Generatoren λ_n , $n = 1, \dots, N_f^2 - 1$. Aufgrund der Normierung lauten die Spurformeln

$$\begin{aligned} \langle \lambda_a \rangle &= 0, \\ \langle \lambda_a \lambda_b \rangle &= 2\delta_{ab}. \end{aligned}$$

Generatoren der $SU(2)$

Aus der allgemeinen Darstellung bekommt man für $SU(2)$ die üblichen drei Pauli-Matrizen

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Sie bilden eine Lie-Algebra mit der Kommutatorrelation

$$\left[\frac{\tau_i}{2}, \frac{\tau_j}{2} \right] = i\varepsilon_{ijk} \frac{\tau_k}{2},$$

wodurch die einfache Struktur der Gruppe deutlich wird. Definiert man mit $\tau_0 = \mathbb{1}$ eine weitere Pauli-Matrix, so ist das Produkt zweier Pauli-Matrizen

$$\tau_i \tau_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \varepsilon_{ijk} \tau_k.$$

Neben der Spurlosigkeit und der Normierung gilt außerdem

$$\langle \tau_i \tau_j \tau_k \rangle = 2i \varepsilon_{ijk}.$$

Generatoren der $SU(3)$

Die $SU(3)$ wird durch insgesamt acht Generatoren erzeugt, diese sind die gewöhnlichen Gell-Mann-Matrizen

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & \sqrt{3} \lambda_8 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die der Lie-Algebra zu Grunde liegenden Kommutatorrelation

$$\left[\frac{\lambda_a}{2}, \frac{\lambda_b}{2} \right] = i f_{abc} \frac{\lambda_c}{2}$$

wird durch die Strukturkonstanten f_{abc} wiedergegeben. Diese sind vollständig antisymmetrisch und haben falls ungleich null die folgenden Werte:

abc	123	147	156	246	257	345	367	458	678
f_{abc}	1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$

Generatoren der SU(4)

Die insgesamt 15 Generatoren der SU(4) lauten

$$\begin{aligned}
 \lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \sqrt{3}\lambda_8 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_9 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \lambda_{10} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_{11} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_{12} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \lambda_{13} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_{14} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & \sqrt{6}\lambda_{15} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Generatoren der SU(2 + 2)

In der Situation SU(2 + 2) liegt im Gegensatz zur SU(2 + 1 + 1) die Hierarchie

$$m_{u,d} \ll m_s \ll m_c$$

nicht vor, so dass die diagonalen Generatoren in einer anderen Basis gewählt werden sollten. Die physikalischen Zustände, die im 2 + 1 + 1-Fall näherungsweise zu den Generatoren λ_8 und λ_{15} gehören, mischen nicht mehr, weil m_s und m_c entartet sind, sondern lassen sich in der neuen Basis

$$\sqrt{2}\lambda_8^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \lambda_{15}^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

angeben. Diese Generatoren sind Linearkombinationen von λ_8 und λ_{15} , die aus der Transformation

$$\begin{pmatrix} \lambda_8^* \\ \lambda_{15}^* \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1 \\ -1 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_8 \\ \lambda_{15} \end{pmatrix}$$

hergeleitet werden können.

B Größen der chiralen Störungstheorie

Twisted basis

Der ungetwistete Massenterm setzt sich aus dem Kontinuumsterm und einer Verschiebung durch den Gitterterm $B_0\tilde{m}_c = B_0m_c + W_0a$ zusammen:

$$\chi'_0 = 2B_0m' = 2B_0(m_0 - \tilde{m}_c).$$

Der getwistete Teil ist

$$\chi'_3 = i2B_0\mu.$$

Der Gitterterm $\rho = 2W_0a$ ist damit in χ'_0 enthalten. Der gesamte symmetriebrechende Teil ist durch

$$\chi' = 2B_0(m' + i\mu) = 2B_0m + 2W_0a + i2B_0\mu$$

gegeben; es ist zu beachten, dass hier $\chi' \neq 2B_0m'$ gilt. Die physikalisch relevante Quarkmasse ist

$$|\chi'| = \sqrt{\chi_0'^2 + \chi_3'^2}.$$

In führender Ordnung ist der Twistwinkel durch den Vakuumwinkel ω_0 aus

$$\langle 0|U|0\rangle = U_0 = \frac{\chi'}{|\chi'|} = e^{i\omega_0\tau_3}$$

gegeben, so dass dieser durch

$$c_0 = \cos(\omega_0) = \frac{\chi'_0}{|\chi'|}, \quad s_0 = \sin(\omega_0) = \frac{\chi'_3}{|\chi'|}$$

bzw. $\tan(\omega_0) = \chi'_3/\chi'_0$ bestimmt werden kann.

Physical basis

Der reine Massenterm entspricht dem im Kontinuum

$$\chi_0 = 2B_0m = 2B_0(m_0 - m_c).$$

Der Gitterterm setzt sich aus den zwei Komponenten

$$\rho_0 = \rho \cos(\omega), \quad \rho_3 = \rho \sin(\omega)$$

zusammen. Der vollständige symmetriebrechende Teil der Lagrangedichte lautet

$$\chi^* = \chi_0 + \rho \cos(\omega) + i\rho \sin(\omega)\tau_3.$$

In dieser Basis unterscheidet sich der durch

$$\tan(\omega) = \frac{\rho_3}{\rho_0}$$

definierte Twistwinkel ω vom Vakuumwinkel in führender Ordnung um Terme von $\mathcal{O}(a)$.

Transformation

Die Transformation des Massen- und Gitterterms von der *twisted basis* χ' in die *physical basis* χ^* erfolgt durch

$$\begin{aligned} e^{i\omega\tau_3}\chi' &= e^{i\omega\tau_3}(\chi'_0 + i\chi'_3\tau_3) \\ &= \chi'_0 \cos(\omega) - \chi'_3 \sin(\omega) + i[\chi'_3 \cos(\omega) + \chi'_0 \sin(\omega)]\tau_3 \\ &= \chi_0 + \rho \cos(\omega) + i\rho \sin(\omega)\tau_3 \\ &= \chi^*. \end{aligned}$$

C Renormierungskoeffizienten

Die Gasser-Leutwyler-Koeffizienten L_i , W_i und W'_i werden in einen renormierten und einen divergenten Anteil aufgespalten. Die Divergenz wird durch die in der dimensionellen Regularisierung der Loop-Beiträge definierte divergente Konstante

$$R = -\frac{2}{\varepsilon} - \ln(4\pi) + \gamma_E - 1$$

im $\overline{\text{MS}}$ -Schema ausgedrückt; ε ist der dimensionelle Entwicklungsparameter.

Die Renormierung erfolgt durch die Aufteilung

$$L_i = L_i^r + \frac{\Gamma_i}{32\pi^2} R, \quad W_i = W_i^r + \frac{\Delta_i}{32\pi^2} R, \quad W'_i = W_i'^r + \frac{\Delta'_i}{32\pi^2} R,$$

die Γ_i sind in folgender Tabelle aufgelistet:

Γ_4	Γ_5	Γ_6	Γ_7	Γ_8
$\frac{1}{8}$	$\frac{N_f}{8}$	$\frac{N_f^2 + 2}{16 N_f^2}$	0	$\frac{N_f^2 - 4}{16 N_f}$

Die für die Gitterterme relevanten Koeffizienten Δ_i und Δ'_i lassen sich nach den Relationen

$$\begin{aligned} \Delta_i &= \Gamma_i \quad \text{für } i = 4, 5, \\ \Delta_i &= 2\Gamma_i \quad \text{für } i = 6, 8, \\ \Delta'_i &= \Gamma_i \end{aligned}$$

auch aus der Tabelle bestimmen.

Für die in der Arbeit relevanten Symmetriegruppen SU(2), SU(3), SU(4) sind die Werte für die Γ_i :

	Γ_4	Γ_5	Γ_6	Γ_7	Γ_8
SU(2)	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{32}$	0	0
SU(3)	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{11}{144}$	0	$\frac{5}{48}$
SU(4)	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{9}{128}$	0	$\frac{3}{16}$

D Lagrangedichte für 2 + 1 + 1 Flavour

Kontaktterme mit zwei Ableitungen

Der für die Feldrenormierung und Zerfallskonstanten relevante Teil der Lagrangedichte enthält alle Kontaktterme mit den Ableitungen $\partial_\mu \phi_a$ und lautet

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{loop},p^2} = & -\frac{1}{4!} \frac{1}{F_0^2} \left[-4 [(\vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi})^2 - |\vec{\pi}|^2 |\partial_\mu \vec{\pi}|^2] - 4 [(\vec{D}_s \partial_\mu \vec{D}_s)^2 - |\vec{D}_s|^2 |\partial_\mu \vec{D}_s|^2] \right. \\
& - [(\vec{K} \partial_\mu \vec{K})^2 - |\vec{K}|^2 |\partial_\mu \vec{K}|^2] - [(\vec{D} \partial_\mu \vec{D})^2 - |\vec{D}|^2 |\partial_\mu \vec{D}|^2] \\
& + |\vec{\pi}|^2 |\partial_\mu \vec{K}|^2 + |\vec{K}|^2 |\partial_\mu \vec{\pi}|^2 + |\vec{\pi}|^2 |\partial_\mu \vec{D}|^2 + |\vec{D}|^2 |\partial_\mu \vec{\pi}|^2 \\
& + 3 [K_4^2 (\partial_\mu K_5)^2 + K_5^2 (\partial_\mu K_4)^2 + K_6^2 (\partial_\mu K_7)^2 + K_7^2 (\partial_\mu K_6)^2] \\
& + 3 [D_9^2 (\partial_\mu D_{10})^2 + D_{10}^2 (\partial_\mu D_9)^2 + D_{11}^2 (\partial_\mu D_{12})^2 + D_{12}^2 (\partial_\mu D_{11})^2] \\
& + [K_4^2 + K_5^2] [(\partial_\mu D_9)^2 + (\partial_\mu D_{10})^2] + [K_6^2 + K_7^2] [(\partial_\mu D_{11})^2 + (\partial_\mu D_{12})^2] \\
& + [D_9^2 + D_{10}^2] [(\partial_\mu K_4)^2 + (\partial_\mu K_5)^2] + [D_{11}^2 + D_{12}^2] [(\partial_\mu K_6)^2 + (\partial_\mu K_7)^2] \\
& + |\vec{K}|^2 |\partial_\mu \vec{D}_s|^2 + |\partial_\mu \vec{K}|^2 |\vec{D}_s|^2 + |\vec{D}|^2 |\partial_\mu \vec{D}_s|^2 + |\partial_\mu \vec{D}|^2 |\vec{D}_s|^2 \\
& + 3 [|\vec{K}|^2 (\partial_\mu \eta_8)^2 + |\partial_\mu \vec{K}|^2 \eta_8^2] \\
& + \frac{1}{3} [|\vec{D}|^2 [(\partial_\mu \eta_8) + \sqrt{8} (\partial_\mu \eta_{15})]^2 + |\partial_\mu \vec{D}|^2 [\eta_8 + \sqrt{8} \eta_{15}]^2] \\
& + \frac{4}{3} [|\vec{D}_s|^2 [(\partial_\mu \eta_8) - \sqrt{2} (\partial_\mu \eta_{15})]^2 + |\partial_\mu \vec{D}_s|^2 [\eta_8 - \sqrt{2} \eta_{15}]^2 \\
& \left. + \eta - \text{Terme} \right].
\end{aligned}$$

Kontaktterme der Form $\phi_a^2 \phi_b^2$

Der für die Massen benötigte Teil enthält alle Terme der Form $\phi_a^2 \phi_b^2$ und hat die Gestalt

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_{\text{loop},m^2} = & -\frac{1}{4!} \frac{1}{F_0^2} \left[+ m_\pi^2 |\vec{\pi}|^4 + m_K^2 |\vec{K}|^4 + m_D^2 |\vec{D}|^4 + m_{D_s}^2 |\vec{D}_s|^4 \right. \\
 & + (m_\pi^2 + m_K^2) |\vec{\pi}|^2 |\vec{K}|^2 + (m_\pi^2 + m_D^2) |\vec{\pi}|^2 |\vec{D}|^2 \\
 & + (m_K^2 + m_{D_s}^2) |\vec{K}|^2 |\vec{D}_s|^2 + (m_D^2 + m_{D_s}^2) |\vec{D}|^2 |\vec{D}_s|^2 \\
 & + (m_K^2 + m_D^2) [K_4^2 + K_5^2] [D_9^2 + D_{10}^2] \\
 & + (m_K^2 + m_D^2) [K_6^2 + K_7^2] [D_{11}^2 + D_{12}^2] \\
 & + m_\pi^2 |\vec{\pi}|^2 [\sqrt{2}\eta_8 + \eta_{15}]^2 \\
 & + |\vec{K}|^2 [(3m_{\eta_8}^2 - m_K^2)\eta_8^2 + m_K^2 \eta_{15}^2 - \sqrt{2}(2m_K^2 - m_\pi^2)\eta_8 \eta_{15}] \\
 & + \frac{1}{3} |\vec{D}|^2 [(m_D^2 + m_\pi^2)\eta_8^2 + (11m_D^2 - 4m_\pi^2)^2 \eta_{15}^2 - \sqrt{2}(2m_D^2 - m_\pi^2)\eta_8 \eta_{15}] \\
 & + \frac{1}{3} |\vec{D}_s|^2 [4(3m_{D_s}^2 - 2m_D^2 + m_\pi^2)\eta_8^2 + (3m_{D_s}^2 + 8m_D^2 - 4m_\pi^2)\eta_{15}^2 \\
 & \quad + 2\sqrt{2}(2m_D^2 - m_\pi^2)\eta_8 \eta_{15}] \\
 & \left. + \eta - \text{Terme} \right].
 \end{aligned}$$

Kontaktterme für die Zerfallskonstanten

Für die Zerfallskonstanten des Mesons ϕ_a sind die Kontaktterme der Form

$$\frac{1}{6F_0} \phi_c^2 A_{c,a}^{\text{loop}} \partial_\mu \phi_a$$

relevant; die $A_{c,a}^{\text{loop}}$ sind dabei die jeweils auftretenden Faktoren. Diese können zu einer 15×15 -Matrix zusammengefasst werden, siehe Tab. D.1 auf der nächsten Seite. Hinzu kommen noch die Mischterme

$$2 \frac{1}{6F_0} \frac{\sqrt{8}}{3} \pi_8 \pi_{15} (\partial_\mu D_9 + \partial_\mu D_{10} + \partial_\mu D_{11} + \partial_\mu D_{12} - 2\partial_\mu D_{s,13} - 3\partial_\mu D_{s,14}).$$

Literaturverzeichnis

- [1] K. G. Wilson. *Confinement Of Quarks*. Phys. Rev. D **10** (1974) 2445.
- [2] K. G. Wilson, *Quarks And Strings On A Lattice*. New Phenomena In Subnuclear Physics. Part A. Proceedings of the First Half of the 1975 International School of Subnuclear Physics, Erice, Sicily, July 11 - August 1, 1975, ed. A. Zichichi, Plenum Press, New York, 1977, p. 69, CLNS-321.
- [3] P. H. Ginsparg and K. G. Wilson. *A Remnant Of Chiral Symmetry On The Lattice*. Phys. Rev. D **25** (1982) 2649.
- [4] M. Luscher. *Exact chiral symmetry on the lattice and the Ginsparg-Wilson relation*. Phys. Lett. B **428** (1998) 342 [arXiv:hep-lat/9802011].
- [5] J. B. Kogut and L. Susskind. *Hamiltonian Formulation Of Wilson's Lattice Gauge Theories*. Phys. Rev. D **11** (1975) 395.
- [6] L. Susskind. *Lattice Fermions*. Phys. Rev. D **16** (1977) 3031.
- [7] M. Creutz. *Four-dimensional graphene and chiral fermions*. JHEP **0804** (2008) 017 [arXiv:0712.1201 [hep-lat]].
- [8] M. Creutz. *Local chiral fermions*. arXiv:0808.0014 [hep-lat].
- [9] R. Frezzotti, P. A. Grassi, S. Sint and P. Weisz. *A local formulation of lattice QCD without unphysical fermion zero modes*. Nucl. Phys. Proc. Suppl. **83** (2000) 941 [arXiv:hep-lat/9909003].
- [10] R. Frezzotti, P. A. Grassi, S. Sint and P. Weisz [Alpha collaboration]. *Lattice QCD with a chirally twisted mass term*. JHEP **0108** (2001) 058 [arXiv:hep-lat/0101001].
- [11] K. Symanzik. *Continuum Limit And Improved Action In Lattice Theories. 1. Principles And Φ^4 Theory*. Nucl. Phys. B **226** (1983) 187.
- [12] K. Symanzik. *Continuum Limit And Improved Action In Lattice Theories. 2. $O(N)$ Non-linear Sigma Model In Perturbation Theory*. Nucl. Phys. B **226** (1983) 205.

- [13] M. Luscher, S. Sint, R. Sommer and P. Weisz. *Chiral symmetry and $O(a)$ improvement in lattice QCD*. Nucl. Phys. B **478** (1996) 365 [arXiv:hep-lat/9605038].
- [14] R. Frezzotti and G. C. Rossi. *Chirally improving Wilson fermions. I: $O(a)$ improvement*. JHEP **0408** (2004) 007 [arXiv:hep-lat/0306014].
- [15] R. Frezzotti and G. C. Rossi. *Chirally improving Wilson fermions*. Nucl. Phys. Proc. Suppl. **129** (2004) 880 [arXiv:hep-lat/0309157].
- [16] S. Scherer. *Introduction to chiral perturbation theory*. Adv. Nucl. Phys. **27** (2003) 277 [arXiv:hep-ph/0210398].
- [17] S. Weinberg. *Phenomenological Lagrangians*. Physica A **96** (1979) 327.
- [18] J. Gasser and H. Leutwyler. *Quark Masses*. Phys. Rept. **87** (1982) 77.
- [19] J. Gasser and H. Leutwyler. *Chiral Perturbation Theory To One Loop*. Annals Phys. **158** (1984) 142.
- [20] J. Gasser and H. Leutwyler. *Chiral Perturbation Theory: Expansions In The Mass Of The Strange Quark*. Nucl. Phys. B **250** (1985) 465.
- [21] G. Rupak and N. Shoresh. *Chiral perturbation theory for the Wilson lattice action*. Phys. Rev. D **66** (2002) 054503 [arXiv:hep-lat/0201019].
- [22] O. Bär, G. Rupak and N. Shoresh. *Chiral perturbation theory at $O(a^2)$ for lattice QCD*. Phys. Rev. D **70** (2004) 034508 [arXiv:hep-lat/0306021].
- [23] S. R. Sharpe and J. M. S. Wu. *Twisted mass chiral perturbation theory at next-to-leading order*. Phys. Rev. D **71** (2005) 074501 [arXiv:hep-lat/0411021].
- [24] S. Aoki. *New Phase Structure For Lattice QCD With Wilson Fermions*. Phys. Rev. D **30** (1984) 2653.
- [25] S. R. Sharpe and R. L. Singleton. *Spontaneous flavor and parity breaking with Wilson fermions*. Phys. Rev. D **58** (1998) 074501 [arXiv:hep-lat/9804028].
- [26] G. Münster. *On the phase structure of twisted mass lattice QCD*. JHEP **0409** (2004) 035 [arXiv:hep-lat/0407006].
- [27] S. R. Sharpe and J. M. S. Wu. *The phase diagram of twisted mass lattice QCD*. Phys. Rev. D **70** (2004) 094029 [arXiv:hep-lat/0407025].
- [28] E. M. Ilgenfritz, W. Kerler, M. Müller-Preussker, A. Sternbeck and H. Stüben. *A nume-*

-
- rical reinvestigation of the Aoki phase with $N_f = 2$ Wilson fermions at zero temperature.* Phys. Rev. D **69** (2004) 074511 [arXiv:hep-lat/0309057].
- [29] F. Farchioni *et al.* *Twisted mass quarks and the phase structure of lattice QCD.* Eur. Phys. J. C **39** (2005) 421 [arXiv:hep-lat/0406039].
- [30] F. Farchioni *et al.* *The phase structure of lattice QCD with Wilson quarks and renormalization group improved gluons.* Eur. Phys. J. C **42** (2005) 73 [arXiv:hep-lat/0410031].
- [31] F. Farchioni *et al.* *Lattice spacing dependence of the first order phase transition for dynamical twisted mass fermions.* Phys. Lett. B **624** (2005) 324 [arXiv:hep-lat/0506025].
- [32] S. Aoki and O. Bär, PoS **LAT2007** (2007) 062 [arXiv:0710.0072 [hep-lat]].
- [33] S. R. Sharpe. *Applications of chiral perturbation theory to lattice QCD.* arXiv:hep-lat/0607016.
- [34] S. R. Sharpe and N. Shoresh. *Physical results from unphysical simulations.* Phys. Rev. D **62** (2000) 094503 [arXiv:hep-lat/0006017].
- [35] A. Morel. *Chiral Logarithms In Quenched QCD.* J. Phys. (France) **48** (1987) 1111.
- [36] S. R. Sharpe and N. Shoresh. *Partially quenched chiral perturbation theory without Φ_0 .* Phys. Rev. D **64** (2001) 114510 [arXiv:hep-lat/0108003].
- [37] S. R. Sharpe. *Enhanced chiral logarithms in partially quenched QCD.* Phys. Rev. D **56** (1997) 7052 [Erratum-ibid. D **62** (2000) 099901] [arXiv:hep-lat/9707018].
- [38] W. H. Jefferys. *On the method of least squares.* Astron. J. **85** (1979) 177.
- [39] M. Lybanon. *A better least-squares method when both variables have uncertainties.* Am. J. Phys. **52** (1984) 22.
- [40] S. L. Marshall, J. G. Blencoe. *Generalized least-squares fit of multiequation models.* Am. J. Phys. **73** (2005) 69.
- [41] Ph. Boucaud *et al.* [ETM Collaboration]. *Dynamical twisted mass fermions with light quarks.* Phys. Lett. B **650** (2007) 304 [arXiv:hep-lat/0701012].
- [42] B. Blossier *et al.* [ETM Collaboration]. *Light quark masses and pseudoscalar decay constants from $N_f = 2$ Lattice QCD with twisted mass fermions.* JHEP **0804** (2008) 020 [arXiv:0709.4574 [hep-lat]].
- [43] R. Frezzotti, G. Martinelli, M. Papinutto and G. C. Rossi. *Reducing cutoff effects in ma-*

- ximally twisted lattice QCD close to the chiral limit.* JHEP **0604** (2006) 038 [arXiv:hep-lat/0503034].
- [44] J. Gasser and H. Leutwyler. *Light Quarks at Low Temperatures.* Phys. Lett. B **184** (1987) 83.
- [45] J. Gasser and H. Leutwyler. *Thermodynamics of Chiral Symmetry.* Phys. Lett. B **188** (1987) 477.
- [46] J. Gasser and H. Leutwyler. *Spontaneously Broken Symmetries: Effective Lagrangians at Finite Volume.* Nucl. Phys. B **307** (1988) 763.
- [47] M. Lüscher. *On A Relation Between Finite Size Effects And Elastic Scattering Processes.*
- [48] G. Colangelo and S. Dürr. *The pion mass in finite volume.* Eur. Phys. J. C **33** (2004) 543 [arXiv:hep-lat/0311023].
- [49] G. Colangelo and C. Haefeli. *An asymptotic formula for the pion decay constant in a large volume.* Phys. Lett. B **590** (2004) 258 [arXiv:hep-lat/0403025].
- [50] G. Colangelo, S. Dürr and C. Haefeli. *Finite volume effects for meson masses and decay constants.* Nucl. Phys. B **721** (2005) 136 [arXiv:hep-lat/0503014].
- [51] G. Colangelo and C. Haefeli. *Finite volume effects for the pion mass at two loops.* Nucl. Phys. B **744** (2006) 14 [arXiv:hep-lat/0602017].
- [52] Y. Y. Lee, C. T. Chen-Tsai. *The Fifteenfold Way of the SU(4) Symmetry Scheme of Strongly Interacting Particles.* Chin. J. Phys. **3** (1965) 45.
- [53] A. M. Abdel-Rehim, R. Lewis, R. M. Woloshyn and J. M. S. Wu. *Lattice QCD with a twisted mass term and a strange quark.* Eur. Phys. J. A **31** (2007) 773 [arXiv:hep-lat/0610090].
- [54] R. Frezzotti and G. C. Rossi. *Twisted-mass lattice QCD with mass non-degenerate quarks.* Nucl. Phys. Proc. Suppl. **128** (2004) 193 [arXiv:hep-lat/0311008].
- [55] R. Baron *et al.* [ETM Collaboration]. *Status of ETMC simulations with $N_f = 2 + 1 + 1$ twisted mass fermions.* PoS **LAT2008** (2008) 094 [arXiv:0810.3807 [hep-lat]].
- [56] M. Creutz. *Aspects of chiral symmetry and the lattice.* Rev. Mod. Phys. **73** (2001) 119 [arXiv:hep-lat/0007032].
- [57] M. Creutz. *Fun with Dirac eigenvalues.* arXiv:hep-lat/0511052.

-
- [58] M. Creutz. *Spontaneous violation of CP symmetry in the strong interactions*. Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 201601 [arXiv:hep-lat/0312018].
- [59] M. Creutz. *One flavor QCD*. Annals Phys. **322** (2007) 1518 [arXiv:hep-th/0609187].
- [60] C. Vafa and E. Witten. *Restrictions On Symmetry Breaking In Vector-Like Gauge Theories*. Nucl. Phys. B **234** (1984) 173.
- [61] R. F. Dashen. *Some features of chiral symmetry breaking*. Phys. Rev. D **3** (1971) 1879.
- [62] A. Armoni, M. Shifman and G. Veneziano. *Exact results in non-supersymmetric large N orientifold field theories*. Nucl. Phys. B **667** (2003) 170 [arXiv:hep-th/0302163].
- [63] A. Armoni, M. Shifman and G. Veneziano. *SUSY relics in one-flavor QCD from a new 1/N expansion*. Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 191601 [arXiv:hep-th/0307097].
- [64] A. Armoni, M. Shifman and G. Veneziano. *QCD quark condensate from SUSY and the orientifold large-N expansion*. Phys. Lett. B **579** (2004) 384 [arXiv:hep-th/0309013].
- [65] A. Armoni, M. Shifman and G. Veneziano. *From super-Yang-Mills theory to QCD: Planar equivalence and its implications*. arXiv:hep-th/0403071.
- [66] G. Veneziano and S. Yankielowicz. *An Effective Lagrangian For The Pure $\mathcal{N} = 1$ Supersymmetric Yang-Mills Theory*. Phys. Lett. B **113** (1982) 231.
- [67] C. Morningstar and M. J. Peardon. *Analytic smearing of SU(3) link variables in lattice QCD*. Phys. Rev. D **69** (2004) 054501 [arXiv:hep-lat/0311018].
- [68] E. Witten. *Current Algebra Theorems For The U(1) Goldstone Boson*. Nucl. Phys. B **156** (1979) 269.
- [69] K. Demmouche, F. Farchioni, A. Ferling, G. Münster, J. Wuilloud, I. Montvay and E. E. Scholz. *Spectrum of 4d N=1 SYM on the lattice with light dynamical Wilson gluinos*. PoS **LAT2008** (2008) 061 [arXiv:0810.0144 [hep-lat]].
- [70] K. Demmouche, F. Farchioni, A. Ferling, I. Montvay, G. Münster, E. E. Scholz and J. Wuilloud. *Dynamical simulation of lattice 4d N=1 SYM*. PoS **Conf8** (2008) 136 [arXiv:0811.1964 [hep-lat]].
- [71] S. Dürr. *M_π^2 versus m_q : Comparing CP-PACS and UKQCD data to chiral perturbation theory*. Eur. Phys. J. C **29** (2003) 383 [arXiv:hep-lat/0208051].
- [72] G. Veneziano. *U(1) Without Instantons*. Nucl. Phys. B **159** (1979) 213.

- [73] S. Dürr, Z. Fodor, C. Hoelbling and T. Kurth. *Precision study of the SU(3) topological susceptibility in the continuum*. JHEP **0704** (2007) 055 [arXiv:hep-lat/0612021].

Eigene Veröffentlichungen

- [A] G. Münster and T. Sudmann. *Twisted mass lattice QCD with non-degenerate quark masses*. JHEP **0608** (2006) 085 [arXiv:hep-lat/0603019].
- [B] T. Chiarappa, F. Farchioni, K. Jansen, I. Montvay, E. E. Scholz, L. Scorzato, T. Sudmann, C. Urbach. *Numerical simulation of QCD with u , d , s and c quarks in the twisted-mass Wilson formulation*. Eur. Phys. J. C **50** (2007) 373 [arXiv:hep-lat/0606011].
- [C] F. Farchioni, I. Montvay, G. Münster, E. E. Scholz, T. Sudmann and J. Wuilloud. *Hadron masses in QCD with one quark flavour*. Eur. Phys. J. C **52** (2007) 305 [arXiv:0706.1131 [hep-lat]].
- [D] F. Farchioni, G. Münster, T. Sudmann, J. Wuilloud, I. Montvay and E. E. Scholz. *Hadron spectrum of QCD with one quark flavor*. PoS **LAT2007** (2007) 135 [arXiv:0710.4454 [hep-lat]].
- [E] Ph. Boucaud *et al.* [ETM collaboration]. *Dynamical Twisted Mass Fermions with Light Quarks: Simulation and Analysis Details*. Comput. Phys. Commun. **179** (2008) 695 [arXiv:0803.0224 [hep-lat]].
- [F] F. Farchioni, I. Montvay, G. Münster, E. E. Scholz, T. Sudmann and J. Wuilloud. *Hadron spectrum of QCD with one quark flavor*. arXiv:0810.0161 [hep-lat].