

Nicht-perturbative Untersuchungen an einem System von leichten und schweren Quarks in kleinem Volumen

als Diplomarbeit vorgelegt von Jan Wennekers

Februar 2003

Institut für Theoretische Physik Westfälische Wilhelms-Universität Münster



Diese korrigierte Version unterscheidet sich geringfügig von der dem Prüfungssekretariat vorgelegten. Die Verbesserungen sind in erster Linie von orthographischer und stilistischer Natur. Dazu kommt ein Faktor a, der in den Gleichungen (4.82) und (4.91) auf unerklärliche Weise abhanden gekommen ist.

Münster, im Mai2003

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

2	Das	Schrödingerfunktional	11		
	2.1	Definition			
	2.2	Bedeutung als Renormierungsschema im endlichen Volumen	12		
	2.3	Step-Scaling	15		
	2.4	uantenmechanische Interpretation des SF			
	2.5	ziertes Hintergrundfeld			
	2.6	Renormierte Kopplung			
	2.7	Fermionische Randfelder			
	2.8	rformulierung			
		2.8.1 Eichwirkung	20		
		2.8.2 Fermionverdopplung	23		
		2.8.3 Wilson-Fermionen	23		
		2.8.4 $O(a)$ -Verbesserung	25		
	2.9	Valenzquark-Näherung	26		
3	Stra	tegie für das Matching von HQET und QCD	29		
	3.1	Die Idee: Gitter-QCD in kleinem Volumen	29		
	3.2	Schwere Quarks auf dem Gitter	Gitter-QCD in kleinem Volumen 29 Quarks auf dem Gitter 31 Station 29		
		3.2.1 Effektive Theorie schwerer Quarks	31		
		3.2.2 Das Problem der additiven Renormierung	32		
	3.3	Matching			
	3.4	Bestimmung von Γ^{rel} in Abhängigkeit von der Quarkmasse	34		

 $\mathbf{7}$

INHALTSVERZEICHNIS

	3.5	Unsich	herheit bei der Fixierung von z	35
4	${f Nic}$	ht-pert	urbative Bestimmung von Verbesserungskoeffizien-	37
	4.1	Die P O	CAC-Relation	37
		4.1.1	Spontan gebrochene Symmetrie	37
		4.1.2	PCAC-Relation auf dem Gitter	38
		4.1.3	Verbesserung von Quark-Bilinearen	39
		4.1.4	Renormierung	39
		4.1.5	PCAC-Relation mit mehreren Quark-Flavours in der Valenzquark-Näherung	41
	4.2	Erwar	tungswerte von Operatoren	42
	4.3	Korrel	ationsfunktionen	43
		4.3.1	Korrelationsfunktionen des Axialvektorstroms	43
		4.3.2	Korrelationsfunktionen des Vektorstroms	45
		4.3.3	Korrelationen zwischen Randfeldern	47
		4.3.4	Korrelationsfunktionen mit nichtentarteten Quarkmassen	47
4.4 Berechnung der Verbesserungskoeffizienten aus den PCAC-M				
	4.5	Numer	rische Ergebnisse	50
		4.5.1	Strategie	50
		4.5.2	Simulationsparameter	51
		4.5.3	Korrelationsfunktionen	53
		4.5.4	Bestimmung der statistischen Fehler	54
		4.5.5	PCAC-Massen	55
		4.5.6	Resultate für b_m	56
		4.5.7	Resultate für $b_A - b_P$	58
		4.5.8	Resultate für Z	59
		4.5.9	Gittereffekte	60
		4.5.10	Universalität des Kontinuumslimes einer geeigneten Ob- servablen	62

5 Nicht-perturbative Bestimmung von Observablen in Abhängigkeit von der Quarkmasse

65

INHALTSVERZEICHNIS

	5.1	Weiter	re Observable	65	
	5.2	Nume	rische Simulation	67	
		5.2.1	Simulationsparameter	67	
		5.2.2	Fehlerabschätzung für z bei gegebenem κ_h	69	
		5.2.3	Resultate für $\Gamma^{\rm rel}$	70	
		5.2.4	Untersuchung der Kontinuums extrapolation für $\Gamma^{\mbox{\tiny rel}}$	72	
		5.2.5	Vergleich mit anderer Definition von $\Gamma^{\rm rel}$ auf dem Gitter $% \Gamma^{\rm rel}$.	73	
		5.2.6	Resultate für Y_R	74	
		5.2.7	Resultate für R_R	75	
	5.3	Unters	suchung des Limes $z \to \infty$ der Observablen $\ldots \ldots \ldots$	76	
		5.3.1	Y_R und R_R	76	
		5.3.2	Differenz der pseudoskalaren und vektoriellen effektiven Massen	76	
	5.4 Vergleich mit Größen aus der statischen Theorie \ldots .				
6	Zus	amme	nfassung	81	
\mathbf{A}	Not	atione	n	83	
	A.1	Expliz	tite Darstellung von Matrizen	83	
		A.1.1	Pauli-Matrizen	83	
		A.1.2	Gell-Mann-Matrizen	83	
		A.1.3	Dirac-Matrizen	84	
$\mathbf{Li}^{\mathbf{r}}$	terat	urverz	zeichnis	85	

INHALTSVERZEICHNIS

Kapitel 1

Einleitung

Die heutige Beschreibung der starken Wechselwirkung innerhalb des Standardmodells der Elementarteilchenphysik ist die *Quantenchromodynamik* (QCD). Die Wechselwirkung wird durch masselose Bosonen, die *Gluonen*, zwischen den i.A. massiven Fermionen, den *Quarks* vermittelt. Diese nichtabelsche Eichtheorie der starken Wechselwirkung kann prinzipiell Quarks mit beliebigen Massen beschreiben.

Für Hochenergie-Prozesse mit kleiner Kopplung ist es möglich perturbativ zu rechnen. Da die Kopplungsstärke der starken Wechselwirkung bei kleinen Energien groß wird, ist die Störungstheorie dort nicht anwendbar. Eine Methode nicht-perturbative Ergebnisse zu erzielen, ist die Gitterformulierung der QCD. Durch Einführung einer Gitterregularisierung ist es möglich, den Niederenergiebereich mit Monte-Carlo-Simulationen (MC) zu untersuchen. Bei der gemeinsamen Behandlung von leichten und schweren Quarks treten bei der praktischen Umsetzung jedoch einige Unvereinbarkeiten auf. Numerische Rechnungen in der QCD stoßen aber bei schweren Quarks wie dem c-, b- oder t-Quark schnell an ihre Grenzen. Mit der Gitterregularisierung wird ein *Cutoff* eingeführt, der dem Inversen des Gitterabstands entspricht. Mit den in den nächsten Jahren erreichbaren Gitterauflösungen ist es nicht möglich, den Cutoff bis über die Massen der schwersten Quarks hinauszuschieben. Deshalb ist es momentan nicht möglich, schwere Quarks auf dem Gitter direkt relativistisch zu behandeln.

Die Behandlung schwerer Quarks ist aber sowohl analytisch als auch numerisch im Rahmen einer effektiven Theorie möglich. Hier werden die Freiheitsgrade, die bei niedrigen Energien vernachlässigbar sind, formal ausintegriert. So wird eine effektive Feldtheorie gefunden, die nur in diesem Energiebereich Gültigkeit besitzt. Bei einem System aus einem leichten und einem schweren Quark — wie dem B-Meson — wird nur das leichte Quark als relativistisches Teilchen der QCD betrachtet. Die Auswirkungen der Dynamik des schweren Quarks innerhalb des Mesons werden als klein angesehen. So eine effektive Theorie schwerer

1. Einleitung

Quarks (*Heavy Quark Effective Theory*, HQET) fasst die Observablen der QCD als eine Reihenentwicklung in $1/m_Q$ auf. Für große Massen m_Q tragen nur die ersten Terme merklich bei. Die einfachste Form der HQET ist die *statische Theorie*, die der niedrigsten Ordnung dieser Entwicklung entspricht.

Um aus Rechnungen in der HQET und deren Ergebnissen Vorhersagen für die volle QCD machen zu können, muss ein *Matching* der beiden Theorien vorgenommen werden. Sollen die Theorien miteinander in Beziehung gesetzt werden, so sind Größen erforderlich, die in beiden Theorien definiert sind. Es ist vorteilhaft, das Matching nicht-perturbativ durchzuführen. Denn die Anwendbarkeit der Störungstheorie ist begrenzt und es ist schwierig die Abweichungen durch nicht-perturbative Effekte abzuschätzen. Dann müssen aber beide Theorien auf dem Gitter formuliert werden, und die gewählten Observablen sich ins Kontinuum extrapolieren lassen.

Das Ziel dieser Arbeit ist, einige Observable auf der relativistischen Seite der Theorie in Abhängigkeit von der Quarkmasse nicht-perturbativ zu bestimmen. Diese können dann u.a. dafür verwendet werden, physikalische Vorhersagen (z.B. für die b-Quark-Masse) im Rahmen der effektiven Theorie zu machen. Darüberhinaus wird ein nicht-perturbativer Test der HQET durch das Studium des Limes großer Quarkmasse geeigneter Observablen durchgeführt. Hierdurch wird auch eine quantitative Abschätzung der $1/m_Q$ -Korrekturen zur statischen Theorie ermöglicht, was bisher noch nicht mit nicht-perturbativer Genauigkeit durchgeführt worden ist.

Zuerst wird im zweiten Kapitel das Schrödingerfunktional (SF) eingeführt. Das SF ist ein endliches Volumen-Schema, in dem man die QCD formulieren kann. Wichtig für nicht-perturbative Rechnungen ist dabei die Übertragung auf das Gitter. Das SF eignet sich besonders zum Berechnen skalenabhängiger Größen über große Energiebereiche. Dabei wird die sogenannte Step-Scaling-Funktion verwendet, die es ermöglicht, schrittweise entfernte Skalen zu verknüpfen. Diese primäre Anwendung des SF spielt hier aber nur eine Nebenrolle. Dennoch ist das endliche Volumen auch für die Untersuchungen dieser Arbeit ein entscheidender Faktor, da nur die Beschränkung auf ein kleines physikalisches Volumen die Berechnungen in der QCD möglich macht. Die untersuchten Observablen sind alle aus Korrelationsfunktionen abgeleitet, die entweder den Axialvektorstrom oder den Vektorstrom enthalten. Das SF erweist sich für die Berechnung von Korrelationsfunktionen als sinnvolles Renormierungsschema. Bei den MC-Simulationen muss auf die Valenzquark-Näherung zurückgegriffen werden. Sie vernachlässigt die Effekte durch Anregung von Quark-Antiquark-Paaren.

Dann wird in Kapitel 3 die Strategie für das Matching zwischen HQET und QCD beschrieben. Das Hauptaugenmerk liegt auf einer Größe Γ , die über den exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktion des Axialvektorstroms definiert wird. In einem genügend großen physikalischen Volumen ($L \approx 2$ fm) entspräche $\Gamma^{\rm rel}$ in der QCD der renormierten Masse des B-Mesons. Aber für ein großes Volumen kann die Gitterauflösung a/L nicht mehr klein genug gehalten werden, um den Kontinuumslimes zu nehmen. Somit ist eine direkte Berechnung auf dem Gitter nicht möglich. Stattdessen wird jetzt das Volumen wesentlich verkleinert ($L \approx 0.2$ fm). Zwar treten dadurch in bestimmten Größen starke endliche Volumen-Effekte auf, aber die Quarkmassenabhängigkeit von $\Gamma^{\rm rel}$ bleibt weiterhin gültig und kann somit studiert werden.

Da für die einzelnen Simulationen jeweils die renormierungsgruppeninvariante (RGI) Quarkmasse konstant gehalten wird, ist es nötig diese Bedingung in das verwendete SF-Schema umzurechnen. Hier gehen mehrere Renormierungskonstanten und Verbesserungskoeffizienten mit unterschiedlich großen statistischen Fehlern ein. Sind die Unsicherheiten in den Parametern zu groß, wird die Genauigkeit der Rechnungen nicht nur durch die eigene Statistik sondern auch wesentlich durch Fortpflanzung dieser Fehlerquellen herabgesetzt. Deshalb werden zwei der Größen, die in diese Umrechnung eingehen, in einer separaten MC-Simulation bestimmt. Der Verbesserungskoeffizient der renormierten Quarkmasse b_m und die Renormierungskonstante Z werden daher für kleinere Kopplungen als bisher präzise bestimmt. Dies wird in Kapitel 4 dargestellt. Die bisherigen Resultate haben für den benötigten Parameterbereich zu große statistische Unsicherheiten. Deshalb ist eine erneute Berechnung notwendig, bevor Γ^{rel} bestimmt werden kann.

Die Berechnung von Γ^{rel} und den anderen Observablen, mit denen die statische Theorie getestet werden kann, erfolgt für verschiedene Werte der Quarkmasse in Kapitel 5 nach der in Kapitel 3 vorgegebenen Strategie. Hier werden die Resultate für b_m und Z aus Kapitel 4 verwendet.

Das abschließende Kapitel 6 fasst die Ergebnisse der vorangegangenen Kapitel knapp zusammen.

1. Einleitung

Kapitel 2

Das Schrödingerfunktional

Die übliche Formulierung von Quantenfeldtheorien im Kontinuum findet im unendlichen Volumen statt. Die dazugehörige Gitterformulierung wird durch periodische Randbedingungen in Raum und Zeit realisiert. Das reale Gittervolumen bleibt hierbei natürlich endlich. Daneben ist auch eine Formulierung möglich, die die Randeffekte durch das endliche Volumen als Observable nutzt.

Ein seit etwa zehn Jahren [1] für analytische und numerische Rechnungen verwandtes, endliches Volumen-Schema ist das *Schrödingerfunktional* (SF).



Abbildung 2.1: Veranschaulichung des Schödingerfunktionals [2]

2.1 Definition

Die Einführung des Schrödingerfunktionals erfolgt zuerst in der kontinuierlichen Notation und nur für die reine nichtabelsche Eichtheorie. Die Formulierung auf dem Gitter wird später nachgeholt (Abschnitt 2.8).

Die Raumzeit in diesem Schema hat eine zylindrische Topologie, Abb. 2.1. An

den zeitlichen Randflächen werden Dirichlet-Randbedingungen für die Vektorpotentiale angenommen,

$$A_k(x) = \begin{cases} C_k^{\Lambda}(\mathbf{x}) & bei \quad x_0 = 0\\ C'_k(\mathbf{x}) & bei \quad x_0 = L \end{cases},$$
(2.1)

mit den klassischen Eichfelder
nCund C'und der lokalen Eichtransformation
 $\Lambda,$ die durch

$$A_k^{\Lambda}(\mathbf{x}) = \Lambda(\mathbf{x})A_k(\mathbf{x})\Lambda(\mathbf{x})^{-1} + \Lambda(\mathbf{x})\partial_k\Lambda(\mathbf{x})^{-1}, \quad \Lambda(\mathbf{x}) \in \mathrm{SU}(N)$$
(2.2)

gegeben ist. In räumlicher Richtung legt man, wie sonst auch, periodische Randbedingungen fest,

$$A_k(x + L\hat{k}) = A_k(x), \qquad \Lambda(\mathbf{x} + L\hat{k}) = \Lambda(\mathbf{x}).$$
(2.3)

Mit der euklidischen Eichwirkung S_G ,

$$S_G[A] = -\frac{1}{2g_0^2} \int d^4 x \, \text{Tr}\{F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}\}, \qquad (2.4)$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu} + [A_{\mu}, A_{\nu}], \qquad (2.5)$$

definiert die euklidische Zustandssumme mit den oben genannten Randbedingungen,

$$\mathcal{Z}[C',C] \equiv \int \mathcal{D}[\Lambda] \int \mathcal{D}[A] e^{-S_G[A]}, \qquad (2.6)$$

$$D[A] = \prod_{\mathbf{x},\mu,a} dA^a_{\mu}(x), \qquad D[\Lambda] = \prod_{\mathbf{x}} d\Lambda(\mathbf{x}) , \qquad (2.7)$$

das Schrödingerfunktional der reinen Eichtheorie. Die Behandlung von Fermionen erfolgt in Abschnitt (2.7).

2.2 Bedeutung als Renormierungsschema im endlichen Volumen

Wo liegt der Vorteil einer Rechnung im endlichen Volumen? Die numerische Berechnung einer Größe, wie zum Beispiel der laufenden Kopplung, die von der Energieskala q abhängt, muss mehrere Randbedingungen erfüllen. Die Rechnung muss den Hochenergiebereich, in dem Störungsrechnung möglich ist, erreichen, um den Anschluss an andere Schemata sicherzustellen.

Der Cutoff durch die Gitterdiskretisierung muss relativ zu diesem Energiebereich ($\mu \approx 10 \text{GeV}$) groß sein. Das bedeutet, das Gitter muss hinreichend fein sein, also einen kleinen Gitterabstand *a* haben. Auf der anderen Seite wird bei jeder Monte-Carlo-Simulation nur ein endliches System betrachtet. Die Gitterlänge L muss groß genug sein, um Randeffekte zu vermeiden. Somit müssen die Bedingungen

$$L \gg \frac{1}{0.4 \text{GeV}} \gg \frac{1}{q} \approx \frac{1}{10 \text{GeV}} \gg a,$$
 (2.8)

gleichzeitig erfüllt sein. Die beiden Energieskalen stehen für den niederenergetischen Bereich der hadronischen Physik, der nicht-perturbativ behandelt werden muss, und den hochenergetischen, perturbativ erfassbaren Bereich. Die hadronische Skala liegt etwa im Bereich des Λ -Parameters der QCD. Die Ungleichung (2.8) lässt sich mit heutigen Computern nicht bewältigen. Die gleichzeitige Abdeckung der verschiedenen Energieskalen verlangt eine Gitterauflösung, die die jetzigen Möglichkeiten weit übersteigt.

Ein Ausweg aus diesem Dilemma ist, die Effekte, die durch das endliche Volumen hervorgerufen werden, selbst als physikalische Observable zu betrachten [3]. Man identifiziert die beiden physikalischen Skalen L und q miteinander, so dass gilt:

$$q = \frac{1}{L}.\tag{2.9}$$

So kann die Berechnung der laufenden Kopplung in mehreren Schritten erfolgen, bei denen jeweils q verdoppelt, d.h. L halbiert wird. Große Differenzen in der Energie werden so in jedem einzelnen Schritt vermieden und der Kontinuumslimes kann genommen werden.

Inzwischen wird das Schrödingerfunktional auch in anderen Problemstellungen verwandt. Insbesondere lassen sich einige Korrelationsfunktionen (Abschnitt 4.3) in diesem Schema effektiv berechnen, aus denen sich wiederum weitere interessante Observable konstruieren lassen.

Beispiel einer multiplikativ renormierten skalenabhängigen Größe

Zur Renormierung einer skalenabhängigen Größe wie z.B. der Quarkmasse ist es nützlich, ein intermediäres Renormierungsschema einzuführen, das sich auf dem Gitter definieren lässt [6]. Damit ist es möglich, die Renormierung mit nichtperturbativer Genauigkeit durchzuführen. Ein Operator der nicht-renormierten Theorie wird über

$$\mathcal{O}_{\text{inter}}(\mu) = Z_{\text{inter}}(g_0, a\mu) \, \mathcal{O}_{\text{bare}}(g_0) \tag{2.10}$$

mit dem Zwischenschema in Beziehung gesetzt. Die Renormierungskonstante Z_{inter} hängt von der nackten Kopplung g_0 und der Energieskala in Gittereinheiten $a\mu$ ab.

Wählt man jetzt wieder das Schrödingerfunktional als Renormierungsschema, ist es möglich, Matrixelemente des Operators $\mathcal{O}_{inter}(\mu)$ von der Form

$$\Phi_{\rm inter}(\mu) \equiv \langle f | \mathcal{O}_{\rm inter}(\mu) | i \rangle \tag{2.11}$$

zu berechnen. Die Zustände f und i sind dann durch Randfelder festgelegt und die Energieskala wird zu $\mu = 1/L$. Die so gewonnenen Matrixelemente müssen noch in renormierungsgruppeninvariante (RGI) Größen umgerechnet werden. Dazu wird Step-Scaling verwendet, um zu hohen Energien zu gelangen. Die Skalenabhängigkeit bei hoher Energie wird dann dabei durch Multiplikation mit einem Exponentialfaktor aufgewogen, in den die Funktionen $\beta(g)$ und $\gamma(g)$ eingehen, die durch Renormierungsgruppengleichungen definiert werden. Der Übergang zu RGI-Größen erfolgt durch

$$\Phi_{\rm RGI} = \Phi_{\rm inter} \times (2b_0 \bar{g}^2)^{-\gamma_0/2b_0} \exp\left\{-\int_0^{\bar{g}} \mathrm{d}g \left[\frac{\gamma(g)}{\beta(g)} - \frac{\gamma_0}{b_0 g}\right]\right\},\tag{2.12}$$

mit $\bar{g} = \bar{g}_{inter}(\mu)$. Daraus folgt

$$\Phi_{\rm RGI} = Z_{\Phi}(g_0)\Phi_{\rm bare}(g_0), \qquad (2.13)$$

$$Z_{\Phi}(g_0) = \frac{\Phi_{\text{RGI}}}{\Phi_{\text{inter}}(\mu)} \times \frac{\Phi_{\text{inter}}(\mu)}{\Phi_{\text{bare}}(g_0)}.$$
 (2.14)

Der erste Faktor ist unabhängig von der Gitterregularisierung und kann im Kontinuumslimes bestimmt werden. Der zweite hängt von der spezifischen Wahl der Gitterregularisierung ab.



Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Vorgehens zur multiplikativen Renormierung mit einem Zwischenschema.

Aus der renormierungsgruppeninvarianten Größe wird schließlich noch das Matrixelement in dem *Matching-Schema* bestimmt, das mit anderen Ergebnissen verglichen werden kann. Hier erhält man einen weiteren universellen Faktor, der störungstheoretisch bestimmt werden kann:

$$\Phi_{\text{match}}(\mu) = \frac{\Phi_{\text{match}}(\mu)}{\Phi_{\text{RGI}}} \times \Phi_{\text{RGI}}.$$
(2.15)

2.3 Step-Scaling

In Abschnitt 2.2 ist bereits deutlich geworden, dass es schwierig ist, mit numerischen Simulationen große Energiebereiche abzudecken. Eine Methode, dieses Problem zu umgehen, ist das sogenannte *Step-Scaling*. Hierbei wird in einem Schema mit endlichem Volumen — wie dem Schrödingerfunktional — abwechselnd die Gitterlänge L und die Gitterauflösung a/L verdoppelt. Im Allgemeinen wird dafür ein beliebiger Faktor s eingeführt [2], der hier aber immer gleich zwei gesetzt werden soll. Die *Step-Scaling-Funktion*

$$\sigma(\bar{g}^2(L)) \equiv \bar{g}^2(2L) \tag{2.16}$$

gibt die renormierte SF-Kopplung für das Gitter mit Länge 2L in Abhängigkeit der Kopplung bei Gitterlänge L an.



Abbildung 2.3: Veranschaulichung des Vorgehens bei der Bestimmung der Step-Scaling-Funktion. Die waagerechten Pfeile entsprechen einer Verdopplung der Gitterlänge, die Pfeile nach links unten einer Halbierung der Auflösung bei konstanter Kopplung.

Um σ zu berechnen wird zuerst die Gitterlänge L um den Faktor 2 erhöht, während der Gitterabstand a festgehalten wird. Im nächsten Schritt wird die Gitterauflösung L/a bei konstanter renormierter Kopplung \bar{g}^2 halbiert, und dabei L konstant gehalten. Dieser Vorgang wird wiederholt, bis man von L = L_0 zu $L = 2^n L_0$ gelangt ist [6]. Hat man σ bzw. die Gitterversion $\Sigma(u, L/a)$ und deren Kontinuumslimes bestimmt, lässt sich für weitere Rechnungen die Richtung des stufenweise Vorangehens umkehren. Man kann also von großen zu kleinen Kopplungen extrapolieren, ohne ein großes physikalisches Volumen für die Monte-Carlo-Rechnungen zu benötigen. Step-Scaling-Funktionen lassen sich auch für andere Größen neben der Kopplung definieren. In [22] sind σ und σ_P , gegeben durch

$$Z_P(2L) = \sigma_P(u)Z_P(L), \quad \text{mit} \quad u \equiv \bar{g}^2(L), \quad (2.17)$$

für die im folgenden relevanten SF-Kopplungen berechnet worden. Die Renormierungskonstante Z_P wird später in (4.38) eingeführt.

2.4 Quantenmechanische Interpretation des SF

Das Schrödingerfunktional ist nicht nur ein nützliches Schema für nicht-perturbative Rechnungen, sondern es hat auch eine quantentheoretische Interpretation, die mit der Schrödingerschen Darstellung der Quantenmechanik in Zusammenhang steht [4, 5]. In der Schrödingerdarstellung von Quantenfeldtheorien sind die quantentheoretischen Zustände der Theorie die Funktionale $\psi[A]$. Für sie lässt sich ein Skalarprodukt formal als

$$\langle \psi | \chi \rangle = \int \mathcal{D}[A] \psi[A]^* \chi[A],$$
 (2.18)

definieren [1]. Nur eichinvariante Zustände, d.h. solche, die

$$\psi[A^{\Lambda}] = \psi[A] \tag{2.19}$$

erfüllen, sind physikalisch. Jedes gegebene Funktional $\psi[A]$ kann durch Integration über alle Eichtransformationen,

$$\psi[A] \to \mathcal{P}\psi[A] = \int \mathcal{D}[\Lambda]\psi[A^{\Lambda}],$$
 (2.20)

auf den physikalischen Unterraum projiziert werden. Im Hinblick auf die Anwendung in der QCD wird als Symmetriegruppe ab jetzt die Colour-SU(3) betrachtet. Prinzipiell gilt die hier gezeigte Interpretation für beliebige Eichtheorien. Das zum Eichfeld A_k^a kanonisch konjugierte Feld ist das Colour-SU(3)-Analogon zum elektrischen Feld,

$$F_{0k}^{a}(\mathbf{x}) = \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta A_{k}^{a}(\mathbf{x})}.$$
(2.21)

Die magnetischen Komponenten des Colour-Feldtensors sind

$$F_{kl}^{a}(\mathbf{x}) = \partial_{k}A_{l}^{a}(\mathbf{x}) - \partial_{l}A_{k}^{a}(\mathbf{x}) + g_{0}f^{abc}A_{k}^{b}(\mathbf{x})A_{l}^{c}(\mathbf{x}).$$
(2.22)

Hiermit erhält man den Hamiltonoperator \mathcal{H} ,

$$\mathcal{H} = \int_0^L \mathrm{d}^3 x \left\{ \frac{g_0^2}{2} F_{0k}^a(\mathbf{x}) F_{0k}^a(\mathbf{x}) + \frac{1}{4g_0^2} F_{kl}^a(\mathbf{x}) F_{kl}^a(\mathbf{x}) \right\},$$
(2.23)

mit der nackten Kopplung g_0 . Die Operatoren \mathcal{H} und \mathcal{P} vertauschen.

Die quantenmechanische Darstellung des Schrödingerfunktionals ist also durch

$$\mathcal{Z}[C',C] = \langle C' | e^{-\mathcal{H}T} \mathcal{P} | C \rangle$$
(2.24)

gegeben. Setzt man nun eine Orthonormalbasis $\{|\psi_n\rangle\}$ aus eichinvarianten Energieeigenzuständen ein, ergibt sich die Spektraldarstellung

$$\mathcal{Z}[C',C] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n T} \psi_n[C'] \psi_n[C]^*.$$
(2.25)

2.5 Induziertes Hintergrundfeld

Für kleine Kopplungen g_0 wird das Funktionalintegral (2.6) von den Feldern um das Minimum der Wirkung herum dominiert [2]. Somit ist eine Entwicklung um dieses Minimum möglich. Eine Lösung der Feldgleichungen $B_{\mu}(x)$ heißt Hintergrundfeld, wenn sie den Randbedingungen (2.1) genügt und sie ein absolutes Minimum der Wirkung ist, d.h.

$$S[A] > S[B] \tag{2.26}$$

für alle Eichfelder A, die nicht gleich einer Eichtransformation B^{Ω} von B sind. Hier ist $\Omega(x)$ eine lokale Eichtransformation für jedes x aus dem Volumen.

Die effektive Wirkung

$$\Gamma[B] \equiv -\ln \mathcal{Z}[C', C] \tag{2.27}$$

hat demnach die perturbative Entwicklung

$$\Gamma[B] = \frac{1}{g_0^2} \Gamma_0[B] + \Gamma_1[B] + g_0^2 \Gamma_2[B] + \dots , \qquad (2.28)$$

$$\Gamma_0[B] \equiv g_0^2 S[B]. \tag{2.29}$$

2.6 Renormierte Kopplung

Eine renormierte Kopplung in einem endlichen Volumen-Schema zu definieren, erfordert eine Größe, die nur von einer Skala, in diesem Fall der Länge Labhängt. Wählt man jetzt $L \cdot B$ so, dass der Term nur von einer dimensionslosen Größe η abhängt, skaliert die Feldstärke mit 1/L. Die Ableitung der effektiven Wirkung

$$\Gamma'[B] \equiv \frac{\partial}{\partial \eta} \Gamma[B] \tag{2.30}$$

ermöglicht es jetzt, durch

$$\bar{g}^2(L) = \frac{\Gamma_0'[B]}{\Gamma'[B]}$$
(2.31)

eine Kopplung zu definieren, die für kleine Kopplungen gegen die nackte Kopplung g_0^2 geht [1]. Der Faktor $\Gamma'_0[B]$ dient hierbei zur Normierung. Mit der Entwicklung von Γ (2.28) ergibt sich

$$\bar{g}^2(L) = g_0^2 - g_0^4 \frac{\Gamma_1'[B]}{\Gamma_0'[B]} + \mathcal{O}(g_0^6).$$
(2.32)

Da L die einzige Längenskala des Schemas ist, ist das so definierte \bar{g} offensichtlich eine Funktion von L. Eine bestimmte Wahl für ein Hintergrundfeld wird von den Randfeldern

$$C_{k} = \frac{i}{L} \begin{pmatrix} \phi_{1} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{2} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{3} \end{pmatrix}, \quad C'_{k} = \frac{i}{L} \begin{pmatrix} \phi'_{1} & 0 & 0 \\ 0 & \phi'_{2} & 0 \\ 0 & 0 & \phi'_{3} \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3,$$
(2.33)

 mit

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \eta - \frac{\pi}{3}, & \phi_1' = \phi_1 - \frac{4\pi}{3}, \\
\phi_2 &= -\frac{1}{2}\eta, & \phi_2' = \phi_3 + \frac{2\pi}{3}, \\
\phi_3 &= -\frac{1}{2}\eta + \frac{\pi}{2}, & \phi_3' = \phi_2 + \frac{2\pi}{2},
\end{aligned}$$
(2.34)

bestimmt [7]. Das hierzu gehörige Hintergrundfeld

$$B_0 = 0, \quad B_k = [x_0 C'_k + (L - x_0)C_k]/L, \quad k = 1, 2, 3,$$
 (2.35)

führt zu einem Feldtensor mit den nicht verschwindenden Komponenten [2]

$$G_{0k} = \partial_0 B_k = (C'_k - C_k)/L, \quad k = 1, 2, 3.$$
 (2.36)

Ein Feld dieser Gestalt bezeichnet man in Analogie zur Elektrodynamik wegen der verschwindenden 'magnetischen' Komponenten als chromoelektrisches Feld.

2.7 Fermionische Randfelder

Um das Schrödingerfunktional der QCD zu betrachten, müssen die bisherigen Überlegungen auf fermionische Felder erweitert werden [8, 9]. Ein besonderes Augenmerk liegt hier auf der Formulierung der Dirichlet-Randbedingungen für die Quarkfelder. Nur die Hälfte der Komponenten der Fermionfelder auf dem Rand kann festgelegt werden, um eine eindeutige Lösung der Dirac-Gleichung, einer Differentialgleichung erster Ordnung, zu ermöglichen.

Die Formulierung der Wirkung für Fermionen im SF erfolgt in zwei Schritten. Zuerst wird die fermionische Wirkung wie üblich durch

$$S_F^{(0)} \equiv \int \mathrm{d}^4 x \mathcal{L}_F(x), \qquad (2.37)$$

$$\mathcal{L}_F(x) \equiv \overline{\psi}(x)[\gamma_\mu D_\mu + m]\psi(x) \qquad (2.38)$$

festgelegt. In die kovarianten Ableitungen gehen die Eichfelder über

$$D_{\mu}\psi(x) \equiv \partial_{\mu}\psi(x) + A_{\mu}\psi(x) \tag{2.39}$$

ein.

Um anschließend die Randbedingungen bei $x_0 = 0$ und $x_0 = L$ zu berücksichtigen werden zwei weitere Terme benötigt. Nach [8] erhält man für die fermionische Wirkung des SF im Kontinuum:

$$S_F = \int d^4 x \overline{\psi}(x) [\gamma_\mu D_\mu + m] \psi(x)$$

- $\int d^3 \mathbf{x} [\overline{\psi}(x) P_- \psi(x)]_{x_0=0}$
- $\int d^3 \mathbf{x} [\overline{\psi}(x) P_+ \psi(x)]_{x_0=L},$ (2.40)

 mit

$$P_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm \gamma_0). \tag{2.41}$$

Auf den Randflächen des Zylinders werden den Quarkfeldern folgende Randbedingungen aufgeprägt:

$$P_{+}\psi|_{x_{0}=0} = \rho, \quad P_{-}\psi|_{x_{0}=L} = \rho', \tag{2.42}$$

$$\overline{\psi}P_{-}|_{x_{0}=0} = \overline{\rho}, \quad \overline{\psi}P_{+}|_{x_{0}=L} = \overline{\rho}'.$$
 (2.43)

Die Felder $\rho, \bar{\rho}, \rho'$ und $\bar{\rho'}$ spielen die gleiche Rolle für Fermionen, wie die Randfelder C und C' im Fall der Eichtheorie.

Nach dem Vorbild der Eichtheorie ist es jetzt zu erwarten, dass die Quarkfelder im SF in räumlicher Richtung periodische Randbedingungen erfüllen werden. Aus praktischen Gründen wird aber noch ein zusätzlicher Phasenfaktor eingeführt, der über einen Winkel θ parametrisiert wird [10]. Die Quarkfelder sind also periodisch bis auf eine Phase,

$$\psi(x + L\hat{k}) = e^{i\theta} \psi(x), \qquad \overline{\psi}(x + L\hat{k}) = e^{-i\theta} \overline{\psi}(x). \qquad (2.44)$$

Eine Begründung, den Winkel θ von Null verschieden zu wählen, liefert die Gitterformulierung des SF im folgenden Abschnitt. Bei numerischen Rechnungen verhindert man mit der zusätzlichen Phase, dass zu kleine Eigenwerte der Fermionmatrix auftreten, wodurch die Invertierung erschwert würde.

Nach der oben beschriebenen Vorgehensweise behält das Schrödingerfunktional

$$\mathcal{Z}[C',\bar{\rho}',\rho';C,\bar{\rho},\rho] = \int \mathcal{D}[A]D[\overline{\psi}]\mathcal{D}[\psi]e^{-S[A,\overline{\psi},\psi]},\qquad(2.45)$$

mit der Wirkung

$$S[A, \overline{\psi}, \psi] = S_G[A] + S_F[A, \overline{\psi}, \psi], \qquad (2.46)$$

die analoge quantenmechanische Interpretation wie in Abschnitt 2.4. Hier ist S_G in Gl. (2.4) definiert.

2.8 Gitterformulierung



Abbildung 2.4: Die zweidimensionale Projektion eines dreidimensionalen kubischen Gitters

Die bisher im Kontinuum definierte Theorie wird jetzt auf ein vierdimensionales hyperkubisches Gitter mit Gitterabstand *a* übertragen. Die Eichfelder A_{μ} werden durch SU(3)-Matrizen $U(x, \mu)$ für jeden Gitterpunkt *x* und jede Richtung $\mu = 0, 1, 2, 3$ repräsentiert. Diese sogenannten Eichlinks sind also effektiv auf den Verbindungen (*links*) der Gitterpunkte definiert. Die Fermionfelder $\psi(x)$ und $\overline{\psi}(x)$ sind nur auf den Gitterpunkten definiert und tragen Dirac-, Farbund Flavour-Indices wie im Kontinuum.

Die Ableitungen werden auf dem Gitter zu endlichen Differenzen. Die kovarianten Vorwärts- und Rückwärtsableitungen werden wie folgt definiert:

$$\nabla_{\mu}\psi(x) = \frac{1}{a}[U(x,\mu)\psi(x+a\hat{\mu})-\psi(x)], \qquad (2.47)$$

$$\nabla^*_{\mu}\psi(x) = \frac{1}{a}[\psi(x) - U(x - a\hat{\mu}, \mu)^{-1}\psi(x - a\hat{\mu})], \qquad (2.48)$$

2.8.1 Eichwirkung

Die Eichwirkung auf dem Gitter wird durch eichinvariante Bildungen aus Links, den Paralleltransportern auf dem Gitter gebildet. Eine mögliche Wahl für eine eichinvariante Größe, die aus Linkvariablen abgeleitet ist, ist die Spur über eine geschlossene Kurve auf dem Gitter, Tr $U(\mathcal{C}_{x,x})$ [11]. Die kleinste geschlossene Kurve auf dem Gitter ist eine *Plakette*. Eine Plakette besteht aus den vier Punkten

$$x, x + a\hat{\mu}, x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu}, x + a\hat{\nu},$$
 (2.49)

die wie in Abbildung 2.5 durchlaufen werden. Der zugehörige Paralleltransporter



Abbildung 2.5: Eine elementare Plakette auf einem hyperkubischen Gitter

$$U_p \equiv U_{x;\mu\nu} \equiv$$
$$U(x, x + a\hat{\nu})U(x + a\hat{\mu}, x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu})U(x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu}, x + a\hat{\mu})U(x + a\hat{\mu}, x) \quad (2.50)$$

wird eine *Plakettvariable* genannt.

Hiermit ist es jetzt nach Wilson [12] möglich, eine Wirkung für die reine Eichtheorie auf dem Gitter zu definieren:

$$S[U] = \sum_{p} S_p(U_p), \qquad (2.51)$$

mit der Plakettwirkung

$$S_p[U] = -\beta \left\{ \frac{1}{2 \operatorname{Tr} \mathbb{1}} \left(\operatorname{Tr} U + \operatorname{Tr} U^{-1} \right) - 1 \right\}$$
(2.52)

$$= \beta \left\{ 1 - \frac{1}{N} \operatorname{Re} \operatorname{Tr} U \right\} \quad \text{für SU}(N) \tag{2.53}$$

Hier enthält die Summe über alle Plaketten p jede Plakette nur in einem Umlaufsinn, d.h.

$$\sum_{p} \equiv \sum_{x} \sum_{1 \le \mu < \nu \le 4}.$$
 (2.54)

Im Folgenden wird die Verbindung der Wilson-Wirkung zur Yang-Mills-Wirkung für Eichfelder im Kontinuum gezeigt. Man führt auf dem Gitter ein Vektorfeld

$$A_{\mu}(x) = -igA^{b}_{\mu}(x)T_{b}$$
(2.55)

ein. Die Generatoren T_b erzeugen die der Symmetriegruppe zugrundeliegende Lie-Algebra. Im Fall der QCD ist die Gruppe die (Colour-)SU(3) und die Generatoren sind die Gell-Mann-Matrizen λ_a (A.3). Sei nun

$$U(x,\mu) \equiv e^{-aA_{\mu}(x)} = 1 - aA_{\mu}(x) + \frac{a^2}{2}A_{\mu}(x)^2 - \dots$$
 (2.56)

Verwendet man jetzt

$$A_{\nu}(x + a\hat{\mu}) = A_{\nu}(x) + a\nabla_{\mu}A_{\nu}(x)$$
(2.57)

und die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$e^{x}e^{y} = e^{x+y+\frac{1}{2}[x,y]+\dots},$$
 (2.58)

so erhält man

$$U_{x;\mu\nu} = e^{-a^2 G_{\mu\nu}(x)}$$
(2.59)

 mit

$$G_{\mu\nu}(x) = F_{\mu\nu}(x) + O(a)$$
 (2.60)

und

$$F_{\mu\nu}(x) = \nabla^f_{\mu} A_{\nu}(x) - \nabla^f_{\nu} A_{\mu}(x) + [A_{\mu}(x), A_{\nu}(x)].$$
 (2.61)

Daraus folgt

$$\operatorname{Tr}\left(U_p + U_p^{-1}\right) = 2\operatorname{Tr} \mathbb{1} + a^4 \operatorname{Tr}\left(F_{\mu\nu}(x)\right)^2 + \mathcal{O}(a^5), \qquad (2.62)$$

da

$$\operatorname{Tr} G_{\mu\nu}(x) = 0.$$
 (2.63)

Also ergibt sich mit

$$\sum_{p} \operatorname{Tr}(F_{\mu\nu})^{2} = \frac{1}{2} \sum_{x,\mu,\nu} \operatorname{Tr}(F_{\mu\nu})^{2}$$
(2.64)

für die Wilson-Wirkung

$$S = -\frac{\beta}{4N} \sum_{x} a^4 \operatorname{Tr} F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x) + \mathcal{O}(a^5).$$
 (2.65)

Für kleinen Gitterabstand a geht die Wilson-Wirkung som
it in die Yang-Mills-Wirkung über, wenn man

$$\beta = \frac{2N}{g_0^2} \tag{2.66}$$

setzt, was im Fall der SU(3)

$$\beta = \frac{6}{g_0^2} \tag{2.67}$$

entspricht. Bei Gitterrechnungen verursacht die Wilson-Wirkung O (a^2) -Cutoff-Effekte.

Anwendung auf das Schrödingerfunktional

Schließlich muss die erhaltene Gitterwirkung noch in den Formalismus des Schrödingerfunktionals integriert werden. Im Inneren des betrachteten Volumens sind keine Änderungen nötig. Die Plakettvariablen auf dem Rand erhalten einen Faktor 1/2. Dazu wird der Gewichtsfaktor

$$w(p) = \begin{cases} 1 & \text{im Inneren} \\ \frac{1}{2} & \text{räumliche Plakette bei } x_0 = 0 \text{ oder } x_0 = T \end{cases}$$
(2.68)

eingeführt. Die Eichwirkung nimmt also die Gestalt

$$S_G[U] = \frac{1}{g_0^2} \sum_p w(p) \operatorname{Tr} \{1 - U(p)\}$$
(2.69)

an [1].

2.8.2 Fermionverdopplung

Die Fermionische Wirkung wird zu einer Summe über alle x aus dem Volumen, d.h. $0 < x_{\mu} < L$,

$$S_F[U,\overline{\psi},\psi] = a^4 \sum_x \overline{\psi}(D+m_0)\psi, \qquad (2.70)$$

mit dem Gitter-Diracoperator

$$D = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^{3} \gamma_{\mu} (\nabla_{\mu}^{*} + \nabla_{\mu}).$$
 (2.71)

Hier gehen die kovarianten Vorwärts- (2.47) und Rückwärtsableitungen (2.48)ein. Diese naive Gitterdiskretisierung führt zum Problem der *Fermionverdopplung*. In *d* Dimensionen entstehen 2^{*d*} Quark-Flavours. Dies wird euphemistisch Verdopplung genannt, obwohl für d = 4 eine Versechzehnfachung vorliegt. Man sieht leicht, dass das Inverse des freien Propagators auf dem Gitter

$$S^{-1}(p) = m_q + \frac{i}{a} \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \sin(ap_{\mu})$$
 (2.72)

im Grenzwert $m_q \rightarrow 0$ 16 Nullstellen an den Ecken der Brillouin-Zone hat und nicht eine wie im Kontinuum [13]. Für die Punkte

$$\Pi^{A} = \left\{ \begin{pmatrix} 0\\0\\0\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pi\\0\\0\\0 \end{pmatrix}, \cdots, \begin{pmatrix} \pi\\\pi\\\pi\\\pi \end{pmatrix} \right\}$$
(2.73)

im Impulsraum wird jeweils ein Quark-Flavour erzeugt.

Es gibt zwei übliche Wege, dieses Problem zu umgehen. Im folgenden werden ausschließlich *Wilson-Fermionen* verwendet; eine Methode, die die Doppler an den Ecken mit Betrag größer null im Kontinuumslimes beliebig schwer werden lässt. Daneben gibt es *staggered fermions* nach Kogut und Susskind [14], die aber für diese Arbeit keine Rolle spielen.

2.8.3 Wilson-Fermionen

Da die Gitterwirkung nur über den korrekten Kontinuumslimes festgelegt ist, ist es möglich höherdimensionale Terme, die mit $a \to 0$ verschwinden, hinzuzuaddieren. Addiert man einen fünfdimensionalen Operator vom Typ $ar\overline{\psi}\Box\psi$ mit

 $r \in [0, 1]$ zur naiven Gitterwirkung, erhält man die Wilson-Wirkung

$$S_W = m_q \sum_x \overline{\psi}(x)\psi(x) + \frac{1}{2a} \sum_{x,\mu} \overline{\psi}(x)\gamma_\mu [U_\mu(x)\psi(x+\hat{\mu}) - U_\mu^{\dagger}(x-\hat{\mu})\psi(x-\hat{\mu})] - \frac{r}{2a} \sum_{x,\mu} \overline{\psi}(x) [U_\mu(x)\psi(x+\hat{\mu}) - 2\psi(x) + U_\mu^{\dagger}(x-\hat{\mu})\psi(x-\hat{\mu})] = \frac{am_q + 4r}{a} \sum_x \overline{\psi}(x)\psi(x) + \frac{1}{2a} \sum_x \overline{\psi} [(\gamma_\mu - r)U_\mu(x)\psi(x+\hat{\mu}) - (\gamma_\mu + r)U_\mu^{\dagger}(x)\psi(x-\hat{\mu})]. \quad (2.74)$$

Hierüber wird die Fermionmatrix (Q_{xy}) definiert:

$$S_W \equiv \sum_{x,y} \overline{\psi'}_x Q_{xy} \psi'_y. \tag{2.75}$$

Die Matrix nimmt die Gestalt

$$aQ_{xy}[U] = \delta_{xy} - \kappa \sum_{\mu} \left[(r - \gamma_{\mu}) U_{x,\mu} \delta_{x,y-a\hat{\mu}} + (r + \gamma_{\mu}) U_{x-a\hat{\mu},\mu}^{\dagger} \delta_{x,y+a\hat{\mu}} \right]$$
(2.76)

an. Die gestrichenen Felder sind durch

$$\kappa = \frac{1}{2am_q + 8r} \tag{2.77}$$

$$\psi'_x = \sqrt{am_q + 4r}\psi_x \tag{2.78}$$

reskaliert. Im Folgenden werden die Striche formal weggelassen und nur noch reskalierte Felder betrachtet.

Für Wilson-Fermionen nimmt der freie Propagator im Impulsraum die Gestalt

$$S(p) = \frac{a}{1 - 2\kappa \sum_{\mu} [r \cos(ap_{\mu}) - i\gamma_{\mu} \sin(ap_{\mu})]}$$
(2.79)

an. Jetzt sieht man, dass die 15 Zustände mit $ap_{\mu} = \pi$ für mindestens ein μ Massen der Ordnung 2rn/a erhalten [13]. n ist die Anzahl der Komponenten des Vektors mit $ap_{\mu} = \pi$.

Der Parameter r läuft von 0 (der naiven Gitterwirkung) bis 1. Somit erhalten alle Quarkzustände mit Ausnahme von $p_{\mu} = 0, \forall \mu = 0, \ldots, 3$ im Kontinuumslimes $a \to 0$ eine unendliche Masse und entkoppeln daher. D.h. sie verschwinden aus dem physikalischen Spektrum. Der zusätzliche Term in der fermionischen Wirkung bricht die chirale Symmetrie explizit. Somit kann diese Symmetrie erst im Kontinuumslimes wiederhergestellt werden. Zudem steigen die Gitterartefakte auf O(a) an. Einen Weg, die chirale Symmetrie bereits auf dem Gitter zu erreichen, ermöglicht die Ginsparg-Wilson-Relation

$$\gamma_5 D + D\gamma_5 = a D\gamma_5 D, \qquad (2.80)$$

die heute als die Realisierung der chiralen Symmetrie auf dem Gitter angesehen wird. Mit einem Diracoperator D, der diese Relation erfüllt, ist es möglich eine Theorie für Fermionen auf dem Gitter zu formulieren, die keine Verdopplung zeigt und die chirale Symmetrie bewahrt [15].

2.8.4 O(a)-Verbesserung



Abbildung 2.6: Graphische Darstellung der zu $F_{\mu\nu}$ beitragenden Linkvariablen

Wie in 2.8.3 erwähnt, lassen sich Terme, die im Kontinuumslimes verschwinden, zur Wirkung addieren. Mit Hilfe von neuen Termen kann die Wirkung somit verbessert werden. Die Idee der O(a)-Verbesserung, die auf Symanzik [4] zurückgeht, besteht darin, alle Gittereffekte der Ordnung *a* durch eine verbesserte Wirkung und verbesserte Operatoren (lokale Produkte von Feldern) zu entfernen. Der numerische Mehraufwand durch die kompliziertere Struktur der Wirkung wird durch die schnellere Konvergenz für $a \to 0$ im Allgemeinen aufgewogen.

In der üblichen Gitterformulierung mit periodischen Randbedingungen in Raum und Zeit ist es möglich, die fermionische Wirkung der QCD mit einem Gegenterm O(a) zu verbessern. Diese verbesserte Wirkung wurde 1985 von Sheikholeslami und Wohlert (SW) vorgeschlagen [16]. Sie hat die Form

$$S_I = S_W + a^5 \sum_x c_{\rm SW} \overline{\psi}(x) \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \psi(x), \qquad (2.81)$$

mit dem Gluon-Feldstärketensor auf dem Gitter $F_{\mu\nu}$, und $\sigma_{\mu\nu}$ definiert in (A.11). Der SW-Term wird auch wegen der Anordnung der zum Gluontensor beitragenden Linkvariablen *clover* (Kleeblatt)-Term genannt, siehe Abbildung 2.6. Der Koeffizient $c_{\rm SW}$ muss richtig eingestellt werden, um die O(a)-Verbesserung zu erreichen. Es liegen nicht-perturbative Ergebnisse für $c_{\rm SW}$ in der Valenzquarknäherung [17] und mit dynamischen Fermionen [18] vor. Im Schrödingerfunktional sind weitere Verbesserungsterme nötig, die durch die Randfelder verursacht werden.

Im Fall der Eichwirkung genügt es den Gewichtsfaktor w(p) (2.68) abzuändern, um die Randeffekte zu kompensieren. Mit

$$w(p) = \begin{cases} c_t(g_0) & \text{Plakette in Zeitrichtung,} \\ & \text{die mit einer Randfläche verbunden ist} \\ \\ \frac{1}{2}c_s(g_0) & \text{räumliche Plakette bei } x_0 = 0 \text{ oder } x_0 = T \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (2.82)$$

und der richtigen Wahl für die Koeffizienten c_s und c_t sind die Gittereffekte der Eichwirkung nur noch von der Ordnung a^2 .

Für die fermionische Wirkung werden Gegenterme der Gestalt

$$S_{F,b} = a^{4} \sum_{\mathbf{x}} \left\{ \left(\tilde{c}_{s} - 1 \right) \left[\widehat{\mathcal{O}}_{s} \left(\mathbf{x} \right) + \widehat{\mathcal{O}}_{s}^{\prime} \left(\mathbf{x} \right) \right] \right.$$
(2.83)

$$+ (\tilde{c}_t - 1) \left[\widehat{\mathcal{O}}_t(\mathbf{x}) + \widehat{\mathcal{O}}'_t(\mathbf{x}) \right] \bigg\}, \qquad (2.84)$$

mit

$$\mathcal{O}_s(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\bar{\rho}(\mathbf{x})\gamma_k(\nabla_k^* + \nabla_k)\rho(\mathbf{x}), \qquad (2.85)$$

$$\mathcal{O}'_{s}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\bar{\rho}'(\mathbf{x})\gamma_{k}(\nabla^{*}_{k}+\nabla_{k})\rho'(\mathbf{x}), \qquad (2.86)$$

$$\mathcal{O}_t(\mathbf{x}) = \left\{ \overline{\psi}(\mathbf{y}) P_+ \nabla_0^* \psi(y) + \overline{\psi}(\mathbf{y}) P_- \overleftarrow{\nabla}_o^* \psi(y) \right\}_{y=(a,\mathbf{x})}, \qquad (2.87)$$

$$\mathcal{O}'_{t}(\mathbf{x}) = \left\{ \overline{\psi}(\mathbf{y}) P_{-} \nabla_{0} \psi(y) + \overline{\psi}(\mathbf{y}) P_{+} \overleftarrow{\nabla}^{*}_{o} \psi(y) \right\}_{y=(a,\mathbf{x})}.$$
 (2.88)

benötigt.

Durch die Wahl des Hintergrundfeldes des SF ist es möglich, die Zahl der benötigten Verbesserungskoeffizienten zu reduzieren. Wählt man die Randfelder so, dass sich das Hintergrundfeld (2.35) ergibt, dann fallen die Randterme weg, die räumliche Plaketten auf dem Rand beinhalten. Da sie nicht mehr kompensiert werden müssen, können die Koeffizienten c_s und \tilde{c}_s gleich eins gesetzt werden.

2.9 Valenzquark-Näherung

Die Berechnung von Observablen erfolgt außerhalb der Störungstheorie hauptsächlich numerisch. Das heißt, die im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Gitterformulierung wird durch Monte-Carlo-Simulationen ausgewertet. Die fermionischen, grassmannwertigen Integrationen können in Form einer Determinante dargestellt werden,

$$\int \mathcal{D}[\overline{\psi}]\mathcal{D}[\psi] e^{-S_F[U]} = \det Q[U].$$
(2.89)

Hier ist Q[U] wiederum die Fermion- oder Quark-Matrix (2.75). Sie nimmt für Wilsonfermionen mit einem Quark-Flavour und r = 1 die Gestalt

$$Q[U]_{xy} = \delta_{xy} - \kappa \sum_{\mu} \delta_{y,x+\hat{\mu}} (1+\gamma_{\mu}) U_{x,\mu}$$
(2.90)

an. Jetzt definiert man die effektive Eichwirkung

$$S_{\text{eff}}[U] \equiv S_G[U] - \ln \det Q[U].$$
(2.91)

Für ein beliebiges Produkt von Feldvariablen

$$\mathcal{O}[U,\overline{\psi},\psi] = \psi_{y_1}\overline{\psi}_{x_1}\cdots\psi_{y_n}\overline{\psi}_{x_n}A[U]$$
(2.92)

erhält man den Erwartungswert

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[U] \, \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}[U]}} A[U] \sum_{z_1, \dots, z_n} \epsilon_{y_1 \cdots y_n}^{z_1 \cdots z_n} Q[U]_{z_1 x_1}^{-1} \cdots Q[U]_{z_n x_n}^{-1}, \qquad (2.93)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[U] \, \mathrm{e}^{-S_G[U]} \, \det Q[U] A[U]$$

$$\times \sum_{z_1, \dots, z_n} \epsilon_{y_1 \cdots y_n}^{z_1 \cdots z_n} Q[U]_{z_1 x_1}^{-1} \cdots Q[U]_{z_n x_n}^{-1}. \qquad (2.94)$$

Die Valenzquark-Näherung vernachlässigt den Einfluss der Determinante der Fermion-Matrix komplett. Setzt man

$$\det Q[U] = konstant, \tag{2.95}$$

so lässt sich der Update-Schritt für die Eichfeldkonfigurationen mit der reinen Eichwirkung S_G durchführen [11]. Auf diesen Konfigurationen müssen dann (nur) noch die Quarkpropagatoren $Q[U]^{-1}$ berechnet werden. Diese Näherung lässt Effekte durch die Entstehung von Quark-Antiquark-Paaren, oder, in der Sprache der Störungstheorie gesprochen, von geschlossenen Quark-Loops, außer Acht. Bisherige Rechnungen haben gezeigt, dass die vernachlässigten Effekte einer Abweichung von etwa 10% entsprechen. Dennoch wird in der Valenzquark-Näherung gerechnet, um die sehr viel aufwendigeren Simulationen mit dynamischen Fermionen zu umgehen. Zur Zeit finden zahlreiche Projekte statt, bisher in Valenzquark-Näherung gerechnete Ergebnisse in voller QCD zu wiederholen [19, 20].

Da sämtliche Rechnungen in dieser Arbeit die Valenzquarknäherung verwenden, wird in den anschließenden Kapiteln nicht gesondert darauf hingewiesen. Auch alle aus der Literatur zitierten nicht-perturbativen Resultate sind *quenched* gerechnet. 2. Das Schrödingerfunktional

Kapitel 3

Strategie für das nicht-perturbative Matching von HQET und QCD

Im Folgenden wird der relativistische Anteil des *Matchings* (der Anpassung) zwischen zwei Beschreibungen schwerer Quarks mit nicht-perturbativer Genauigkeit durchgeführt. Auf der einen Seite steht die *statische Näherung*, die die einfachste Form einer effektiven Theorie schwerer Quarks (heavy quark effective theory, HQET) darstellt. Auf der anderen Seite steht die übliche relativistische Quantenchromodynamik. Da die Behandlung schwerer Quarks wie des b-Quarks mit den heute behandelbaren Gitterausdehnungen nicht möglich ist, muss auf andere Methoden zurückgegriffen werden. Die relativistische Behandlung wird hier in einem unphysikalisch kleinen Volumen durchgeführt. Auf diese Weise ist zwar eine realistische Beschreibung von hadronischen Zuständen, die schwere Quarks enthalten, nicht unmittelbar möglich, aber die Abhängigkeit geeigneter renormierter Größen von der Quarkmasse kann untersucht werden, um sie später mit entsprechenden Größen in der effektiven Theorie in Beziehung zu setzen.

3.1 Die Idee: Gitter-QCD in kleinem Volumen

Bevor auf die HQET in Abschnitt 3.2 genauer eingegangen wird, soll hier schon einmal skizziert werden, wie man relativistische QCD und HQET in nichtperturbativer Weise in Beziehung setzen kann, um daraus physikalische Vorhersagen der effektiven Theorie abzuleiten. Als ein Beispiel wird später die Bestimmung der b-Quarkmasse in der statischen Approximation [25] herangezogen. Erwartungswerte von Observablen in der QCD sind mit denjenigen in der effektiven Theorie durch eine sogenannte *Operatorproduktentwicklung* verknüpft [21]. Um den Erwartungswert einer Observablen in der vollen QCD durch die effektive Theorie auszudrücken, wird er in eine Reihe in $1/m_Q$, mit der Masse des schweren Quarks m_Q , entwickelt. Die Reihe hat die Form

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{QCD}} = c_0(\mu) \langle \mathcal{O}_0(\mu) \rangle_{\text{HQET}} + \frac{c_1(\mu)}{2m_Q} \langle \mathcal{O}_1(\mu) \rangle_{\text{HQET}} + \dots$$
(3.1)

Die Terme auf der rechten Seite haben jeweils zwei Anteile mit unterschiedlicher Energieabhängigkeit. Die Erwartungswerte in der HQET entsprechen den niederenergetischen Beiträgen, da die HQET per constructionem gerade eine effektive Niederenergietheorie für hadronische Systeme mit schweren Quarks ist. Die Vorfaktoren $c_i(\mu)$ sind die Korrekturen durch hochenergetische Beiträge, sie werden auch Wilson-Koeffizienten genannt [21]. Die Berechnung beider Faktoren gibt Grenzen für die Energieskala μ vor. Die Wilson-Koeffizienten werden mit Methoden der Störungstheorie berechnet. Somit muss μ deutlich oberhalb der Confinement-Skala der QCD liegen. Die HQET gilt jedoch nur für Energien deutlich unterhalb der schweren Quarkmasse. Daraus resultiert für die Energieskala μ :

$$\Lambda_{\rm QCD} \ll \mu \ll m_Q. \tag{3.2}$$

Da μ noch den perturbativen Bereich erreichen muss, kommen nur sehr schwere Quarks, typischerweise das b-Quark, für die Anwendung der HQET in Frage.

Um sich eine Abhängigkeit zwischen der vollen und der effektiven Theorie auch nicht-perturbativ auf dem Gitter nutzbar zu machen, muss insbesondere die linke Seite von Gleichung (3.1) auf das Gitter übertragen werden. Die Voraussetzung für eine aussagekräftige Kontinuumsextrapolation ist eine hinreichend feine Gitterauflösung a/L. Der Cutoff muss oberhalb der Masse der schweren Quarks liegen,

$$aM_Q \ll 1. \tag{3.3}$$

Im Hinblick auf die späteren Rechnungen wird von nun an die RGI-Quarkmasse M_Q als Massenparameter verwendet. Dann ist aber eine große Gitterlänge L mit heutigen Mitteln nicht mehr zu realisieren. Als Ausweg verkleinert man das Volumen. Dies würde zwar in bestimmten physikalischen Observablen zu großen endlichen Volumen-Effekten führen, aber die Quarkmassenabhängigkeit geeigneter renormierter Größen kann in diesem Rahmen weiterhin sinnvoll studiert werden.

Die Simulationen finden also bei kleinem Volumen, aber mit hoher Gitterauflösung statt. Im Schrödingerfunktional wird die Energieskala μ mit dem Inversen der Gitterlänge L identifiziert, vergleiche Abschnitt 2.2. Die Anwendbarkeit der HQET liefert somit die Bedingung

$$M_Q L_0 \gg 1. \tag{3.4}$$

Eine sinnvolle Wahl für die Länge L_0 in physikalischen Einheiten kann jetzt abgeschätzt werden, wenn man geeignete Vorgaben für die Quarkmasse macht. Nimmt man für das b-Quark eine zu erwartende RGI-Masse von etwa 7 GeV an, erfüllt eine Länge der Größenordnung von 0.2 fm die Bedingung (3.4).

Da die Rechnung entlang einer Linie konstanter Physik und im SF als einem endlichen Volumen-Schema durchgeführt werden soll, ist es aus praktischen Überlegungen sinnvoll, L_0 in Einheiten der sogenannten Skala $L_{\rm max}$ auszudrücken, die durch

$$\bar{g}^2(L_{\rm max}) = 3.48$$
 (3.5)

definiert wird. Für $L_n \equiv 2^{-n}L_{\text{max}}$ sind die SF-Kopplung \bar{g}^2 und die zur jeweiligen Gitterauflösung gehörenden Werte für β aus der Bestimmung der RGI-Quarkmasse im SF durch die ALPHA-Kollaboration [22] bekannt.

Als Anknüpfungspunkt benötigt man noch L_{\max} in physikalischen Einheiten. Hier können die Ergebnisse von Arbeiten zur phänomenologisch motivierten Skala r_0 [23, 24] verwendet werden. Das Verhältnis der beiden Skalen im Kontinuumslimes wird in [24] mit

$$\frac{L_{\max}}{r_0} = 0.738(16) \tag{3.6}$$

angegeben. Da r_0 von der Größenordnung 0.5 fm ist, erhält man für L_{\max} etwa 0.36 fm. Jetzt definiert man

$$L_0 \equiv \frac{1}{2} L_{\max} \tag{3.7}$$

und erhält so eine Längenskala L_0 , die (3.4) mit $M_Q = M_b$ erfüllt. Für dieses L_0 ist im Zusammenhang mit der Step-Scaling-Funktion für die RGI-Quarkmasse [22] folgendes bekannt:

$$\bar{g}^2(L_0) = 2.4$$
 . (3.8)

Für alle Rechnungen wird jeweils die renormierte SF-Kopplung auf diesem Wert gehalten. Die Quarkmasse wird auf verschiedene Werte im Bereich der b-Quarkmasse eingestellt. So kann die Abhängigkeit der Observablen von der Quarkmasse untersucht werden.

3.2 Schwere Quarks auf dem Gitter

3.2.1 Effektive Theorie schwerer Quarks

Die Masse schwerer Quarks ist zu groß, um sie direkt auf dem Gitter zu simulieren, da sie über dem Cutoff 1/a liegt. Die Idee der HQET ist es jetzt, eine effektive Theorie zu formulieren, die man durch die Entwicklung der Lagrange-Dichte nach Potenzen von 1/m erhält [6]. Die nullte Ordnung der Entwicklung

$$\mathcal{L}_{\text{HQET}} = \mathcal{L}_{h}^{\text{stat}} + \frac{1}{m} \mathcal{L}_{h}^{(1)} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{m^{2}}\right), \qquad (3.9)$$

$$\mathcal{L}_h^{\text{stat}} = \overline{\psi}_h (D_0 + m) \psi_h, \qquad (3.10)$$

wird *statische Theorie* genannt. Die höheren Ordnungen werden als Korrekturen zur statischen Theorie betrachtet. Die Felder ψ_h und $\overline{\psi}_h$ erfüllen die Relationen

$$P_+\psi_h = \psi_h, \qquad (3.11)$$

$$\overline{\psi}_h P_+ = \overline{\psi}_h, \qquad (3.12)$$

mit $P_{\pm} = \frac{1 \pm \gamma_0}{2}$. Zwei ihrer Komponenten können zu Null gewählt werden, weil sie wegen $P_-P_+ = 0$ nur zwei verbleibende Freiheitsgrade besitzen. Da nur die zeitliche Ableitung in die Lagrangedichte $\mathcal{L}_h^{\text{stat}}$ eingeht, propagieren statische Quarks nur vorwärts in der Zeit [26].

3.2.2 Das Problem der additiven Renormierung

Diese Theorie schwerer Quarks verfügt nicht über die chirale Symmetrie, wie im Fall leichter, relativistischer Quarks, vergleiche Abschnitt 4.1.1. Die Beziehung

$$Z(m_b^{\text{bare}} + \delta m) = m_b \tag{3.13}$$

zwischen der nackten Quarkmasse m_b^{bare} und der renormierten Masse m_b enthält einen additiven Term, δm . Aus dimensionellen Gründen ist δm linear divergent. In der Gitterregularisierung ist es hier nicht möglich die Renormierungskonstanten mit Hilfe chiraler Ward-Identitäten zu bestimmen [6]. Bestimmt man den Term perturbativ, ist es nicht möglich, zum Kontinuum zu extrapolieren, da die Koeffizienten alle mit 1/a skalieren. Mit der Idee des Matchings zwischen HQET und QCD wird dieses Problem umgangen, indem die nackte b-Quarkmasse m_b^{bare} durch die RGI-Quarkmasse ersetzt wird [25].

3.3 Matching

In der statischen Theorie setzt sich die Masse des B-Mesons aus der nackten b-Quarkmasse und der statischen Bindungsenergie E^{stat} plus höheren Termen zusammen,

$$m_B = E^{\text{stat}} + m_b^{\text{bare}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{m_b}\right). \tag{3.14}$$

Da die Quarkmasse über δm additiv renormiert wird, kann die Theorie auch mit verschwindender Quarkmasse in der Lagrangedichte formuliert werden: $\mathcal{L}_{h}^{\text{stat}} = \overline{\psi}_{h} D_{0} \psi_{h}$. Der Massenterm entsteht so erst während der Renormierung. Damit kann man+ die Größe m_{b}^{bare} in (3.14) von nun an so auffassen, dass sie nur noch multiplikativ zu renormieren ist.

Jetzt werden geeignete Größen definiert, die es ermöglichen, die Theorien in Beziehung zu setzen. Um m_b^{bare} in der statischen Theorie durch die renormierte Quarkmasse in der QCD zu ersetzen, wird eine *Matching-Bedingung* gefordert:

$$\Gamma^{\rm rel}(L, M, g_0) = \Gamma_R^{\rm stat}(L, M, g_0) \tag{3.15}$$

$$= \Gamma^{\text{stat}}(L, g_0) + m_b^{\text{bare}}(M, g_0) + O\left(\frac{1}{M}\right).$$
 (3.16)

 Γ^{rel} hängt i.A. von der RGI-Quarkmasse M ab. Hierzu werden effektive Massen Γ^{rel} und Γ^{stat} eingeführt, die aus Korrelationsfunktionen mit relativistischen beziehungsweise statischen Quarks abgeleitet sind. Die Korrelationsfunktionen werden in Kapitel 4 ausführlich behandelt. Dort wird für den Axialvektorstrom die Korrelationsfunktion f_A (4.46) definiert. Mit der verbesserten Form

$$f_A^I(x_0) = f_A(x_0) + ac_A \tilde{\partial}_0 f_P(x_0)$$
(3.17)

lässt sich jetzt

$$\Gamma^{\rm rel} \equiv -\tilde{\partial}_0 \ln[f_A^I(x_0)] \Big|_{x_0 = \frac{L}{2}}$$
(3.18)

definieren. Ließe sich Γ^{rel} in einem großen (physikalischen) Volumen berechnen, entspräche es der Masse des B-Mesons in der vollen QCD.

Die statische Version wird nach [26] analog gebildet. Die Zeitkomponente des statischen Axialstroms,

$$A_0^{\text{stat}}(x) \equiv \overline{\psi}_l \gamma_0 \gamma_5 \psi_h(x), \qquad (3.19)$$

setzt sich aus einem relativistischen Anti-Quark-Feld $\overline{\psi}_l$ und einem statischen Quark-Feld ψ_h zusammen. Die Gittervariante der dazugehörigen Korrelationsfunktion nimmt die Form

$$f_A^{\text{stat}}(x_0) = -a^6 \sum_{\mathbf{y}, \mathbf{z}} \frac{1}{2} \langle A_0^{\text{stat}}(x) \overline{\zeta}_h(\mathbf{y}) \gamma_5 \zeta_l(\mathbf{z}) \rangle, \qquad (3.20)$$

mit einem schweren, statischen Randfeld $\overline{\zeta}_h$ und einem leichten relativistischen ζ_l , an. Somit definiert man Γ^{stat} als

$$\Gamma^{\text{stat}} \equiv -\tilde{\partial}_0 \ln[f_A^{\text{stat}}(x_0)]\Big|_{x_0 = \frac{L}{2}}.$$
(3.21)

In großem Volumen ist f_A^{stat} eine Korrelationsfunktion, die wie $e^{-E^{\text{stat}}x_0}$ abfällt. Mit (3.16) und $L_n \equiv 2^n L_0$ lässt sich die B-Meson-Masse jetzt als

$$m_B = E^{\text{stat}} - \Gamma^{\text{stat}}(L_0) + \Gamma^{\text{rel}}(L_0, M_b)$$
 (3.22)

$$= [E^{\text{stat}} - \Gamma^{\text{stat}}(L_n)] + [\Gamma^{\text{stat}}(L_n) - \Gamma^{\text{stat}}(L_0)] + \Gamma^{\text{rel}}(L_0, M_b) (3.23)$$

schreiben. Die beiden Terme in den eckigen Klammern sind Energie-Differenzen in der statischen Theorie. Sie müssen deshalb nicht additiv renormiert werden. Die Differenz $\Gamma^{\text{stat}}(L_n) - \Gamma^{\text{stat}}(L_0)$ kann mit Step-Scaling bestimmt werden [25]. Der verbleibende Term $\Gamma^{\text{rel}}(L_0, M_b)$ trägt die gesamte Abhängigkeit von der Quarkmasse. Deshalb wird in Kapitel 5 die Abhängigkeit von Γ^{rel} von der Quarkmasse nicht-perturbativ untersucht.

3.4 Bestimmung von Γ^{rel} in Abhängigkeit von der Quarkmasse

Um einen Ubergang zum Kontinuum zu ermöglichen, muss für die Simulationen die physikalische Situation fixiert werden. Die Rechnungen sollen bei konstanter Physik ablaufen. Dies lässt sich durch eine bestimmte Wahl von g_0 , $m_{0,l}$ und $m_{0,h}$ für jeden Wert von L/a realisieren. Die ersten beiden Bedingungen werden durch Festlegung der Schrödingerfunktionalkopplung $\bar{g}(L) = 2.4484$ und der Forderung, dass das leichte Quark masselos sein soll,

$$m_l = 0, \tag{3.24}$$

mit der subtrahierten nackten Masse des leichten Quarks m_l , erfüllt. Diese Wahl ist sinnvoll, da aus früheren Simulationen im Zusammenhang mit der Bestimmung der RGI-Quarkmasse für bestimmte Werte der SF-Kopplung die dazugehörigen Werte für $\beta = 6/g_0^2$ und für den kritischen Hopping-Parameter κ_c bekannt sind [22]. Setzt man $\kappa_l = \kappa_c$, so wird als Folge der Definition des kritischen Hopping-Parameters $m_l(\kappa_c) = 0$.

Die Abhängigkeit von Γ^{rel} von $m_{0,h}$ lässt sich durch die Bedingung

$$z \equiv L_0 M_h = konstant \tag{3.25}$$

eliminieren. Hier ist M_h die RGI-Quarkmasse des schweren Quarks. Sie wird über die O(a) verbesserte subtrahierte Quarkmasse $\tilde{m}_{q,h}$ (4.24) zu den Simulationsparametern in Beziehung gesetzt,

$$M_{h} = \frac{M_{h}}{m_{R}(\mu_{0})} \frac{m_{R}(\mu_{0})}{\widetilde{m}_{q,h}} \widetilde{m}_{q,h} \equiv Z_{M} \widetilde{m}_{q,h}, \quad \mu_{0} = \frac{1}{L_{0}}.$$
 (3.26)

wobei m_R die renormierte (laufende) PCAC-Quarkmasse in dem gewählten SF-Schema ist. Die Renormierungskonstante Z_M zerfällt in zwei Anteile,

$$h(L) \equiv \frac{M_h}{m_R(\mu_0)} \quad \text{bei} \quad \mu = \mu_0 \tag{3.27}$$

und

$$\frac{m_R(\mu_0)}{\tilde{m}_{q,h}} = Z_m(g_0, L) \quad \text{bei} \quad \mu = \mu_0.$$
(3.28)

Die Renormierungskonstante der Quarkmasse Z_m wird später in Abschnitt 4.1.4 eingeführt.

Man fixiert also die Quarkmasse, bzw. die dimensionslose Quarkmasse z für eine Rechnung auf einen festen Wert und extrapoliert die untersuchten Größen zum Kontinuumslimes. Durch mehrere Simulationen mit verschiedenen Quarkmassen, kann die Abhängigkeit des Kontinuumslimes der untersuchten Größen von z, also z.B. $\Gamma^{rel}(z)$ berechnet werden. Für die Bestimmung von $h(L_0)$ sind eine bestimmte Anzahl von Schritten mit der Step-Scaling-Funktion σ_P nötig, siehe Abschnitt 2.3. Die Transformation zwischen den Skalen erfolgt durch

$$\frac{M_h}{\overline{m}_h(\mu_0)} = \frac{Z_P(L_0)}{Z_P(2L_{\max})} \cdot \frac{M_h}{\overline{m}_h(\mu)}$$
(3.29)

Das Verhältnis $Z_P(L_0)/Z_P(2L_{\text{max}})$ wird über σ_P bestimmt, und zwar durch

$$\frac{Z_P(L_0)}{Z_P(2L_{\max})} = \frac{1}{\sigma_P(3.48) \cdot \sigma_P(2.4484)}, \qquad \text{mit} \quad L_0 = \frac{1}{2}L_{\max}.$$
(3.30)

Der verbleibende Faktor ist bereits aus der Berechnung des Quarkmasserenormierungsfaktors [22] bekannt,

$$\frac{M}{\overline{m}(\mu)} = 1.157(15)$$
 bei $\mu = \frac{1}{2L_{\text{max}}}.$ (3.31)

3.5 Unsicherheit bei der Fixierung von z

Bei der Umrechnung der Bedingung z = konstant in die relevanten Simulationsparameter (κ_h) gehen verschiedene Größen ein, die mit unterschiedlich großen statistischen oder systematischen Fehlern behaftet sind. Die Fehler begrenzen die Genauigkeit, mit der die Rechnung wirklich bei konstanten physikalischen Bedingungen durchgeführt wird. Der Hopping-Parameter κ_h legt über

$$am_{q,h} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa_h} - \frac{1}{\kappa_c} \right) \tag{3.32}$$

die nackte subtrahierte Quarkmasse $am_{q,h}$ fest. Nach der Vorschrift

$$a\widetilde{m}_{q,h} = am_{q,h} \left(1 + b_m am_{q,h}\right) \tag{3.33}$$

wird sie verbessert. Will man κ_h aus z bestimmen, müssen die vorherigen Relationen invertiert werden. Für κ als Funktion von am_q erhält man

$$\kappa = \frac{1}{2am_q + \frac{1}{\kappa_c}}.$$
(3.34)

Und mit festem $a\widetilde{m}_{q,h}$ ergibt sich aus (3.33)

$$am_{q,h} = -\frac{1}{2b_m} - \sqrt{\frac{1}{4b_m^2} + \frac{a\widetilde{m}_{q,h}}{b_m}}.$$
 (3.35)

Für $a\widetilde{m}_{q,h}$ setzt man das geforderte

$$a\widetilde{m}_{q,h} = a\frac{M_h}{Z_M}$$
$$= \frac{a}{L_0} \cdot \frac{z}{Z_M}$$
(3.36)

ein. Also ist das Resultat für κ_h als Funktion von z:

$$\kappa_h = \frac{1}{2\left[-\frac{1}{2b_m} - \sqrt{\frac{1}{4b_m^2} + \frac{a}{L_0} \cdot \frac{z}{Z_M b_m}}\right] + \frac{1}{\kappa_c}}.$$
 (3.37)

Damit die Wurzel in Gleichung (3.35) reell bleibt, kann $am_{q,h}$ nur Werte bis zu der Grenze

$$am_{q,h} < -\frac{1}{4b_m} \tag{3.38}$$

annehmen. Da b_m über den gesamten untersuchten Parameterbereich nicht kleiner als -0.7 wird [27], ergibt sich für $am_{q,h}$ die Grenze 0.35. Die gewählten Massen M können also nicht beliebig groß werden.

Fasst man jetzt umgekehrt z als Funktion der verschiedenen in seine Festlegung eingehenden Größen auf,

$$z = z(h(L), Z(g_0, L), Z_A(g_0, L), Z_P(g_0, L), b_m(g_0)),$$
(3.39)

so gehen, trotz eines zugehörigen festen Wertes für κ_h , ihre Unsicherheiten in z ein. Der Faktor h(L) ist im Kontinuumslimes bestimmt. Sein Fehler kann erst einbezogen werden, nachdem der Kontinuumslimes der betrachteten Größen durchgeführt wurde. Bisher liegt der überwiegende Anteil der Unsicherheit in den Werten für b_m und Z. Die ursprüngliche nicht-perturbative Bestimmung dieser Größen [27] deckt den für Untersuchungen schwerer Quarks benötigten Bereich der Kopplung nicht ab. Bei einer konservativen Fehlerabschätzung liegt die Unsicherheit durch Extrapolation von den Daten bei höheren Kopplungen bei etwa fünf Prozent für b_m und einem Prozent für Z. Also ist es notwendig, b_m und Z für kleinere Kopplungen neu und präzise zu bestimmen, um genauere Ergebnisse für Γ^{rel} in Abhängigkeit von der Quarkmasse zu erhalten, da diese dann auch in abgeleitete Größen, wie z.B. M_b , einfließen würden. Im nächsten Kapitel wird eben diese Rechnung beschrieben.
Kapitel 4

Nicht-perturbative Bestimmung von Verbesserungskoeffizienten

4.1 Die PCAC-Relation

4.1.1 Spontan gebrochene Symmetrie

Betrachtet man ein Dublett von leichten Quarks

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

 mit

$$m_u = m_d \approx 0, \tag{4.2}$$

so hat die Lagrangedichte der QCD eine approximative $SU(2)_V \otimes SU(2)_A$ -Symmetrie [49]. Der Vektorstrom

$$V^a_\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_\mu \frac{1}{2}\tau^a \psi(x) \tag{4.3}$$

und der Axialvektorstrom

$$A^a_\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_\mu\gamma_5 \frac{1}{2}\tau^a\psi(x) \tag{4.4}$$

sind erhalten, wenn man die Quarkmassen vernachlässigt. Hierbei sind τ^a die Generatoren der SU(2), die Pauli-Matrizen (A.2). γ_5 ist auf die übliche Weise in (A.9) definiert.

Die Quarkfelder lassen sich in einen links- und einen rechtshändigen Anteil aufteilen:

$$\psi = \psi_l + \psi_r, \qquad \overline{\psi} = \overline{\psi}_l + \overline{\psi}_r,$$
(4.5)

mit

$$\psi_l = \left(\frac{1-\gamma_5}{2}\right)\psi, \qquad \psi_r = \left(\frac{1+\gamma_5}{2}\right)\psi.$$
(4.6)

Hiermit sicht man, dass der Vakuumerwartungswert der skalaren Quarkdichte (Quark-Kondensat) nicht verschwindet,

$$\begin{array}{lll} \langle 0|\overline{\psi}\psi|0\rangle &=& \langle 0|(\overline{\psi}_{l}+\overline{\psi}_{r})(\psi_{l}+\psi_{r})|0\rangle \\ &=& \langle 0|\overline{\psi}_{l}\psi_{l}+\overline{\psi}_{r}\psi_{l}+\overline{\psi}_{l}\psi_{r}+\overline{\psi}_{r}\psi_{r}|0\rangle \\ &=& \underbrace{\langle 0|\overline{\psi}_{l}\psi_{l}|0\rangle}_{=0}+\underbrace{\langle 0|\overline{\psi}_{r}\psi_{l}|0\rangle}_{\neq 0}+\underbrace{\langle 0|\overline{\psi}_{l}\psi_{r}|0\rangle}_{\neq 0}+\underbrace{\langle 0|\overline{\psi}_{r}\psi_{r}|0\rangle}_{=0} \\ &=& \langle 0|\overline{\psi}_{r}\psi_{l}+\overline{\psi}_{l}\psi_{r}|0\rangle\neq 0. \end{array}$$

$$(4.7)$$

Da der Vakuumerwartungswert nicht mehr die volle Symmetrie der Lagrangedichte aufweist, ist die SU(2)_A-Symmetrie spontan gebrochen. Es verbleibt noch die SU(2)_V-Symmetrie. Durch spontane Symmetriebrechung entsteht nach dem *Goldstone-Theorem* [28, 29] für jede spontan gebrochene Symmetrie ein masseloses bosonisches Teilchen. Für die drei Generatoren der SU(2) erwartet man also drei masselose Bosonen zu finden. Da die Symmetrie von vornherein nur approximativ erfüllt war — die Quarkmassen sind i.A. nur klein und nicht gleich null —, erhalten die Goldstone-Bosonen eine geringe Masse [11]. Es sind die Pionen π^+ , π^0 und π^- . Diese pseudoskalaren Mesonen haben im Vergleich zu den leichtesten Baryonen kleine Massen, die experimentell sehr genau bestimmt sind [30],

$$m_{\pi^{\pm}} = 139.57018(35) \text{ MeV},$$
 (4.8)

$$m_{\pi^0} = 134.9766(6) \text{ MeV.}$$
 (4.9)

4.1.2 PCAC-Relation auf dem Gitter

Für die exakte $SU(2)_A$ -Symmetrie ist der Axialvektorstrom A_{μ} erhalten; seine Divergenz verschwindet. Auch diese Beziehung muss durch den approximativen Charakter der Symmetrie abgeändert werden. Die Erhaltung des Axialvektorstroms A_{μ} bis auf einen lokalen Term,

$$\partial_{\mu}A^{a}_{\mu} = 2mP^{a}, \qquad (4.10)$$

wird PCAC-Relation (*partially conserved axial current*) genannt. P^a ist die pseudoskalare Dichte, definiert als

$$P^{a}(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_{5}\frac{1}{2}\tau^{a}\psi(x).$$
(4.11)

Der Vorfaktor m hat die Dimension einer Masse und wird später (Abschnitt 4.1.4) eine weitere Definition der renormierten Quarkmasse ermöglichen.

Auf dem Gitter bleibt die PCAC-Relation nur bis auf O(a)-Gitterartefakte gültig. Diese können auf $O(a^2)$ vermindert werden, wenn der Koeffizient c_{SW} des Sheikholeslami-Wohlert-Terms (4.96) in der Wirkung sowie der Verbesserungskoeffizient des Axialstroms c_A [31] geeignet gewählt werden.

4.1.3 Verbesserung von Quark-Bilinearen

Um Operatoren bis zur Ordnung a^2 zu verbessern, ist es nötig, die lokalen Felder zusätzlich zur Verbesserung der Wirkung mit lokalen Gegentermen zu versehen [33]. Der verbesserte Axialstrom ergibt sich aus

$$(A_I)^a_{\mu} = A^a_{\mu} + c_A a \tilde{\partial}_{\mu} P^a.$$
(4.12)

 ∂_{μ} ist die symmetrisierte Gitterableitung

$$\tilde{\partial}_{\mu} \equiv \frac{1}{2} (\partial_{\mu} + \partial_{\mu}^{*}), \qquad (4.13)$$

bestehend aus der üblichen Vorwärtsableitung

$$\partial_{\mu}f(x) \equiv \frac{1}{a}[f(x+a\hat{\mu}) - f(x)], \qquad (4.14)$$

und der Rückwärtsableitung

$$\partial_{\mu}^{*} f(x) \equiv \frac{1}{a} [f(x) - f(x - a\hat{\mu})].$$
 (4.15)

Der Verbesserungskoeffizient ist in der Valenzquarknäherung nicht-perturbativ bestimmt worden [17],

$$c_A = -0.00756g_0^2 \frac{1 - 0.748g_0^2}{1 - 0.977g_0^2}.$$
(4.16)

Die Kurve ist ein rationaler Fit an die Daten und für $0 \le g_0^2 \le 1$ gültig. Für die pseudoskalare Dichte wird kein Gegenterm benötigt, sie ist bereits O(a)-verbessert,

$$\left(P_{I}\right)^{a} = P^{a}.\tag{4.17}$$

Die Verbesserung anderer Quark-Bilinearer verläuft nach dem gleichen Schema.

4.1.4 Renormierung

Die Renormierung von Kopplung und Quarkmasse erfolgt in der unverbesserten Theorie rein multiplikativ und unabhängig von der Quarkmasse durch

$$g_R^2 = Z_g(g_0^2, a\mu)g_0^2, (4.18)$$

$$m_R = Z_m(g_0^2, a\mu)m_q, (4.19)$$

mit der subtrahierten nackten Quarkmasse $m_q = m_0 - m_c$.

Bei der Verbesserung der Wirkung wird von den drei prinzipiell möglichen Termen,

$$\mathcal{O}_1 = \overline{\psi} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \psi, \qquad (4.20)$$

$$\mathcal{O}_2 = m \operatorname{Tr} \{ F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \}, \qquad (4.21)$$

$$\mathcal{O}_3 = m^2 \overline{\psi} \psi, \qquad (4.22)$$

nur der erste betrachtet [31], siehe Abschnitt 2.9. Die beiden anderen Terme entsprechen einer Umdefinition der nackten Kopplung (\mathcal{O}_2) bzw. der nackten Quarkmasse (\mathcal{O}_3). Deshalb muss die Definition der renormierten Größen in der verbesserten Theorie leicht abgeändert werden, da sonst Cutoff-Effekte der Ordnung am_q in einigen Korrelationsfunktionen nicht aufgehoben würden [33]. Vor der Renormierung ist es daher nötig die nackten Parameter nach der Vorschrift

$$\tilde{g}_0^2 = g_0^2 (1 + b_g a m_q), \tag{4.23}$$

$$\widetilde{m}_q = m_q (1 + b_m a m_q) \tag{4.24}$$

zu reskalieren. Um O(a)-Verbesserung zu erreichen, müssen die Koeffizienten b_g und b_m ebenso wie die Verbesserungskoeffizienten der Wirkung richtig gewählt werden. Ein Teil dieser Arbeit beschäftigt sich damit, b_m in einem relevanten Parameterbereich zu bestimmen.

Die Definition der verbesserten renormierten Parameter verläuft jetzt analog zum unverbesserten Fall,

$$g_R^2 = Z_g(g_0^2, a\mu)\tilde{g}_0^2, \qquad (4.25)$$

$$m_R = Z_m(g_0^2, a\mu)\widetilde{m}_q. \tag{4.26}$$

Die gleiche Prozedur ist für die renormierten verbesserten Felder nötig. Der verbesserte Axialvektorstrom (4.12) und die pseudoskalare Dichte (4.11) erhalten auch *b*-Faktoren, bevor sie renormiert werden,

$$(A_R)^a_{\mu} = Z_A(1 + b_A a m_q) (A_I)^a_{\mu}, \qquad (4.27)$$

$$(P_R)^a = Z_P (1 + b_P a m_q) P^a. (4.28)$$

Für andere Felder, die sich multiplikativ renormieren lassen, gelten analoge Formeln.

Mit verbesserter Wirkung und renormiertem, verbessertem Axialstrom ermöglicht die PCAC-Relation eine zweite Definition der renormierten O(a)-verbesserten Quarkmasse:

$$m_R = \frac{Z_A (1 + b_A a m_q)}{Z_P (1 + b_P a m_q)} m.$$
(4.29)

Hier ist m die nackte Strommasse, die durch ein Matrixelement der PCAC-Relation (4.10) bestimmt ist. Andererseits kann die renormierte Quarkmasse nach der ursprünglichen Definition (4.26) bestimmt werden. Aus den beiden Gleichungen für m_R erhält man

$$m = \frac{Z_m Z_P}{Z_A} \cdot \frac{(1 + b_m a m_q)(1 + b_P a m_q)}{1 + b_A a m_q} m_q \tag{4.30}$$

und durch Entwicklung nach Potenzen von a

$$m = Zm_q \left(1 + [b_m - b_A + b_P] am_q\right) + O(a^2), \qquad (4.31)$$

 mit

$$Z = \frac{Z_m Z_P}{Z_A}.$$
(4.32)

Z hängt nur von $\tilde{g}_0^2 = g_0^2 (1 + b_g a m_q)$ ab.

Gleichung (4.31) zeigt, dass die Kombination $b_m - b_A + b_P$ bestimmt werden kann, indem man m in Abhängigkeit von m_q bei festem \tilde{g} betrachtet. Hält man stattdessen g_0 konstant, gibt es einen weiteren Beitrag zur Entwicklung von m. Aus der Taylor-Reihe von Z,

$$Z(g_0^2 + \Delta g_0^2) = Z(g_0^2) + \frac{\partial Z}{\partial g_0^2} \,\Delta g_0^2 + \mathcal{O}\left((\Delta g_0^2)^2\right), \tag{4.33}$$

ergibt sich mit $\Delta g_0^2 = g_0^2 b_g a m_q$ für *m* als Funktion von g_0^2 :

$$m = \left[Z + \frac{\partial Z}{\partial g_0^2} g_0^2 b_g a m_q\right] m_q \left(1 + [b_m - b_A + b_P] a m_q\right) + \mathcal{O}\left(a^2\right)$$
$$= Zm_q \left(1 + \left[b_m - b_A + b_P + g_0^2 b_g \frac{\partial Z}{\partial g_0^2} \middle/ Z\right] a m_q\right) + \mathcal{O}\left(a^2\right)$$
$$= Zm_q \left(1 + \left[b_m - b_A + b_P + g_0^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial g_0^2} b_g\right] a m_q\right) + \mathcal{O}\left(a^2\right). \quad (4.34)$$

Die Renormierungskonstante Z ist jetzt Funktion von g_0^2 . Zur Bestimmung der renormierten verbesserten Quarkmasse m_R reicht es jedoch nicht, die Kombination $b_m - b_A + b_P$ zu bestimmen. Dazu müssen b_m und $b_A - b_P$ jeweils einzeln ermittelt werden.

4.1.5 PCAC-Relation mit mehreren Quark-Flavours in der Valenzquark-Näherung

Die Valenzquarknäherung der QCD (siehe Abschnitt 2.9) bildet die Grundlage für die numerischen Simulationen, die in den folgenden Kapiteln dargestellt werden. Die quenched Näherung ermöglicht die separate Berechnung von $b_A - b_P$ und b_m . In dieser Approximation verschwindet der Koeffizient b_g . Wichtiger ist aber, dass die Theorie so auch mit untereinander verschiedenen Quarkmassen behandelbar bleibt, während in der vollen Theorie eine Vielzahl neuer Verbesserungskoeffizienten auftritt. Jedes einzelne Quark-Flavour f_i lässt sich hier nach (4.24) getrennt verbessern. Da die Isospinsymmetrie für unterschiedliche Quarkmassen gebrochen ist, ist es sinnvoll, folgende Linearkombinationen der bilinearen Felder einzuführen:

$$A^{\pm}_{\mu} = A^{1}_{\mu} \pm i A^{2}_{\mu}, \qquad P^{\pm} = P^{1} \pm i P^{2}.$$
(4.35)

Diese erfüllen die PCAC-Relation bis auf Cutoff-Effekte,

$$\partial_{\mu}A^{\pm}_{\mu} = (m_{f_1} + m_{f_2})P^{\pm}. \tag{4.36}$$

Die Verbesserung der Felder bleibt gleich bis auf die Tatsache, dass jetzt der Mittelwert der subtrahierten nackten Quarkmassen mit b_A bzw. b_P multipliziert wird. Der verbesserte Axialstrom hat demnach die Form

$$(A_R)^{\pm}_{\mu} = Z_A \left[1 + b_A \frac{1}{2} (am_{q,1} + am_{q,2}) \right] (A_I)^{\pm}_{\mu}, \qquad (4.37)$$

und analog gilt für die pseudoskalare Dichte

$$(P_R)^{\pm} = Z_P \left[1 + b_P \frac{1}{2} (am_{q,1} + am_{q,2}) \right] (P_I)^{\pm} .$$
(4.38)

In Abschnitt 4.4 wird gezeigt, dass die Abhängigkeit von den Massen derart ist, dass b_m und $b_A - b_P$ unabhängig voneinander bestimmt werden können.

4.2 Erwartungswerte von Operatoren

Mit dem Schrödingerfunktional lassen sich Erwartungswerte von Operatoren berechnen. Dazu wird ein Operator \mathcal{O} betrachtet, der aus einem beliebigen Produkt von Feldern im Inneren des Volumens und auf dem Rand besteht. Man identifiziert — wie in der Formulierung der Quantisierung mit Funktionalintegralen üblich — die Felder mit Funktionalableitungen nach *Quelltermen*. Die Wirkung erhält zusätzlich den fermionischen Quellterm [34],

$$S_S[\psi, \bar{\psi}, \eta, \bar{\eta}] \equiv \bar{\eta}\psi + \bar{\psi}\eta. \tag{4.39}$$

Dann identifiziert man

$$\psi(x) \longrightarrow \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(x)}, \qquad \bar{\psi}(x) \longrightarrow -\frac{\delta}{\delta \eta(x)}.$$
(4.40)

Diese Wahl ist sofort einsichtig, da aus

$$\frac{\delta}{\delta\eta(x)}\mathrm{e}^{-S-S_s} = -\bar{\psi}\mathrm{e}^{-S-S_s} \tag{4.41}$$

 sofort

$$\frac{\delta}{\delta\eta(x)} \mathrm{e}^{-S-S_s} \bigg|_{\bar{\eta}=\eta=0} = -\bar{\psi} \mathrm{e}^{-S} \tag{4.42}$$

folgt. Neben den Eichfeldern und den Quark- und Antiquarkfeldern kann \mathcal{O} auch *Randfelder* enthalten, die in Ableitungen nach den Quelltermen auf dem Rand übergehen [31]:

$$\zeta(\mathbf{x}) \longrightarrow \frac{\delta}{\delta \bar{\rho}(\mathbf{x})}, \qquad \bar{\zeta}(\mathbf{x}) \longrightarrow -\frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{x})}, \qquad (4.43)$$

$$\zeta'(\mathbf{x}) \longrightarrow \frac{\delta}{\delta \bar{\rho}'(\mathbf{x})}, \qquad \bar{\zeta}'(\mathbf{x}) \longrightarrow -\frac{\delta}{\delta \rho'(\mathbf{x})}.$$
 (4.44)

Jetzt ist der Erwartungswert des Operators \mathcal{O} durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \left\{ \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[A] \mathcal{D}[\bar{\psi}] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{O} e^{-S[A, \bar{\psi}, \psi, \bar{\rho}, \rho, \bar{\rho}', \rho'] - S_S[\bar{\psi}, \psi, \bar{\eta}, \eta]} \right\}_{\bar{\rho}' = \rho' = \bar{\rho} = \bar{\rho} = \bar{\eta} = \eta = 0}$$
(4.45)

gegeben. Die numerische Berechnung von Erwartungswerten erfolgt in dieser Arbeit ausschließlich im Rahmen der Valenzquarknäherung, siehe Abschnitt 2.9.

4.3 Korrelationsfunktionen

Im Formalismus des Schrödingerfunktionals lassen sich auch Korrelationsfunktionen definieren. Eine wichtige Anwendung der im vorangegangenen Abschnitt 4.2 beschriebenen Berechnung von Erwartungswerten im SF ist die Berechnung von Korrelationsfunktionen für verschiedene Quarkbilineare.

4.3.1 Korrelationsfunktionen des Axialvektorstroms

Für die in Abschnitt 4.1 definierten bilinearen Bildungen definiert man

$$f_A(x_0) \equiv -a^6 \sum_{\mathbf{y},\mathbf{z}} \frac{1}{3} \langle A_0^3(x) \, \bar{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_5 \frac{1}{2} \, \tau^3 \, \zeta(\mathbf{z}) \rangle, \qquad (4.46)$$

$$f_P(x_0) \equiv -a^6 \sum_{\mathbf{y},\mathbf{z}} \frac{1}{3} \langle P^3(x)\bar{\zeta}(\mathbf{y})\gamma_5 \frac{1}{2}\tau^3 \zeta(\mathbf{z}) \rangle.$$
(4.47)

Die Korrelationsfunktionen enthalten jeweils vier fermionische Felder; zwei auf dem Rand (ζ und $\overline{\zeta}$) und zwei im gesamten Volumen definierte. Die Summen laufen über das räumliche Volumen. Das führt zu

$$f_A(x_0) = -a^6 \sum_{\mathbf{y},\mathbf{z}} \frac{1}{3} \langle \bar{\psi}(x) \gamma_0 \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^3 \psi(x) \, \bar{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^3 \, \zeta(\mathbf{z}) \rangle, \qquad (4.48)$$

$$f_P(x_0) = -a^6 \sum_{\mathbf{y}, \mathbf{z}} \frac{1}{3} \langle \bar{\psi}(x) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^3 \psi(x) \ \bar{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^3 \zeta(\mathbf{z}) \rangle, \qquad (4.49)$$

mit den Definitionen für A^3_{μ} (4.4) und P^3 (4.11). Die Grassmann-Integrationen über den fermionischen Anteil der Funktionalintegrals werden jetzt explizit ausgeführt. Nach dem Wick-Theorem für Fermionen [35] ergeben sich Ausdrücke, die nur noch fermionische Zweipunktfunktionen enthalten,

$$f_A(x_0) = -a^6 \sum_{\mathbf{y},\mathbf{z}} \frac{1}{2} \langle \operatorname{Tr}\{[\zeta(\mathbf{z})\bar{\psi}(x)]_F \gamma_0 \gamma_5[\psi(x)\bar{\zeta}(\mathbf{y})]_F \gamma_5\} \rangle_G, \quad (4.50)$$

$$f_P(x_0) = -a^6 \sum_{\mathbf{y},\mathbf{z}} \frac{1}{2} \langle \operatorname{Tr}\{[\zeta(\mathbf{z})\bar{\psi}(x)]_F \gamma_5[\psi(x)\bar{\zeta}(\mathbf{y})]_F \gamma_5\} \rangle_G, \qquad (4.51)$$

 mit

$$\langle \mathcal{O} \rangle_G = \frac{\int \mathcal{D}[U] \mathcal{O} e^{-S_G[U]}}{\int \mathcal{D}[U] e^{-S_G[U]}}.$$
(4.52)

Die Kontraktionen der Quark-Felder lassen sich durch Propagatoren $\bar{S}(x)$ vom Rand bis zum Punkt x ausdrücken. \bar{S} ist definiert durch

$$\sum_{x} Q(y,x)\bar{S}(x) = KU^{\dagger}(0,\mathbf{x};0)\gamma_{5}P_{+}, \qquad (4.53)$$

wobei Q die Fermionmatrix (2.75) ist. In die Normierung K geht auch der Verbesserungskoeffizient \tilde{c}_t ein, siehe Abschnitt 2.8.4. Somit nimmt die Korrelationsfunktion f_A die Form

$$f_A(x_0) = -a^6 \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{x}} \langle \operatorname{Tr} \{ \bar{S}^{\dagger}(x) \gamma_0 \bar{S}(x) \} \rangle_G$$
(4.54)

an.



Abbildung 4.1: Veranschaulichung der Korrelationsfunktionen im Schrödingerfunktional. Die unregelmäßigen Linien repräsentieren die Trajektorien eines Quarks und eines Anti-Quarks, die zur Zeit $x_0 = 0$ entstehen und sich am Punkt x gegenseitig vernichten.

Um f_A explizit zu berechnen stellt man die Projektoren P_{\pm} in der chiralen Basis [34] dar:

$$P_{-} = \frac{1}{2}(1 - \gamma_{0}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad P_{+} = \frac{1}{2}(1 + \gamma_{0}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & -\mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & \mathbb{1} \end{pmatrix}.$$
(4.55)

Im Folgenden stehen die griechischen Indizes für Elemente im Colour-Raum und die großen lateinischen Buchstaben für Dirac-Indizes. Aus Gleichung (4.53) folgt mit $P_+P_- = 0$ sofort $\bar{S}P_- = 0$, oder in Komponentenschreibweise

$$S_{A1} + S_{A3} = 0, \qquad S_{A2} + S_{A4} = 0. \tag{4.56}$$

Das reduziert die Anzahl der unabhängigen Elemente von $\overline{S} = (S_{AB})$ auf die Hälfte. Die Summation über den zweiten Diracindex C läuft also nur noch von 1 bis 2:

$$f_A(x_0) = -\langle \sum_{\mathbf{x}} \sum_{C=1}^{2} \sum_{\gamma,\beta,B} \bar{S}^*_{\beta B;\gamma C}(x) \left[\gamma_0 \bar{S}(x)\right]_{\beta B;\gamma C} \rangle_G.$$
(4.57)

Die Matrix $A \equiv \bar{S}^{\dagger} \gamma_0 \bar{S}$ hat vier unabhängige Komponenten und nimmt mit γ_0 aus (A.7) die Gestalt

4

$$A = \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix} \quad \text{mit } a \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$$
(4.58)

an. Für die Elemente von a erhält man

$$a_{11} = -2 \operatorname{Re}(S_{11}^{\dagger} S_{31} + S_{21}^{\dagger} S_{41}), \qquad (4.59)$$

$$a_{21} = -(S_{12}^{*\dagger}S_{31} + S_{22}^{*\dagger}S_{41} + S_{32}^{*\dagger}S_{11} + S_{42}^{*\dagger}S_{21}), \qquad (4.60)$$

$$a_{12} = (a_{21})^{*\dagger} = -(S_{12}S_{31}^{*\dagger} + S_{22}S_{41}^{*\dagger} + S_{32}S_{11}^{*\dagger} + S_{42}S_{21}^{*\dagger}), \qquad (4.61)$$

$$a_{22} = -2\operatorname{Re}(S_{12}^{\dagger}S_{32} + S_{22}^{\dagger}S_{42}).$$
(4.62)

Schließlich verbleibt für den in die Monte-Carlo-Simulation eingehenden Ausdruck für f_A :

$$f_A(x_0) = 2 \langle \sum_{\mathbf{x}} \operatorname{Re}[S_{11}^{\dagger} S_{31} + S_{21}^{\dagger} S_{41} + S_{12}^{\dagger} S_{32} + S_{22}^{\dagger} S_{42}] \rangle_G.$$
(4.63)

Die Rechnung lässt sich analog für f_P wiederholen. Man erhält f_P , wenn man in Gleichung (4.57) γ_0 durch -1 ersetzt.

4.3.2 Korrelationsfunktionen des Vektorstroms

Für die Korrelationsfunktion des Vektorstroms (4.3)

$$k_V(x_0) \equiv -\frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \sum_{\mathbf{y},\mathbf{z}} \langle V_k^3(x) \, \bar{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_k \frac{1}{2} \tau^3 \zeta(\mathbf{z}) \rangle , \qquad (4.64)$$

ist ein ähnliches Vorgehen möglich. Mit der Definition des Propagators vom Rand zum Punkt x (4.53) lässt sich auch hier nach erneuter Anwendung des Wickschen Theorems die Darstellung

$$k_V(x_0) = \frac{1}{3} \langle \sum_{k=1}^3 \sum_{\mathbf{x}} \{ \operatorname{Tr} \gamma_k \bar{S}^{\dagger}(x) \gamma_k \bar{S}(x) \rangle_G$$
(4.65)

finden.

Die einzelnen Summanden der Summe über k haben aber durch die γ -Matrizen (A.7) eine unterschiedliche Struktur. Man erhält

$$B \equiv \gamma_{1}\bar{S}^{\dagger}\gamma_{1}\bar{S} = \begin{pmatrix} b & -b \\ -b & b \end{pmatrix} \text{ mit } b \in \mathbb{C}^{2\times2}, \qquad (4.66)$$

$$b_{11} = S_{12}^{*\dagger}S_{41} + S_{22}^{*\dagger}S_{31} - S_{32}^{*\dagger}S_{21} - S_{42}^{*\dagger}S_{11}, \\b_{21} = S_{11}^{*\dagger}\bar{S}_{41} + S_{22}^{*\dagger}\bar{S}_{31} - S_{31}^{*\dagger}\bar{S}_{21} - S_{41}^{*\dagger}\bar{S}_{11}, \\b_{12} = S_{12}^{*\dagger}\bar{S}_{42} + S_{22}^{*\dagger}\bar{S}_{32} - S_{31}^{*\dagger}\bar{S}_{22} + S_{42}^{*\dagger}\bar{S}_{12}, \\b_{22} = S_{11}^{*\dagger}\bar{S}_{42} + S_{21}^{*\dagger}\bar{S}_{32} - S_{31}^{*\dagger}\bar{S}_{22} + S_{41}^{*\dagger}\bar{S}_{12}, \\C \equiv \gamma_{2}\bar{S}^{\dagger}\gamma_{2}\bar{S} = \begin{pmatrix} c & -c \\ c & -c \end{pmatrix} \text{ mit } c \in \mathbb{C}^{2\times2}, \qquad (4.67)$$

$$c_{11} = -(S_{12}^{*\dagger}\bar{S}_{41} + S_{22}^{*\dagger}\bar{S}_{31} + S_{32}^{*\dagger}\bar{S}_{21} - S_{42}^{*\dagger}\bar{S}_{11}), \\c_{21} = 2\operatorname{Re}(S_{11}^{*\dagger}\bar{S}_{41} - S_{21}^{*\dagger}\bar{S}_{31}), \\c_{12} = 2\operatorname{Re}(S_{12}^{*\dagger}\bar{S}_{42} - S_{22}^{*\dagger}\bar{S}_{32}), \\c_{22} = S_{11}^{*\dagger}\bar{S}_{42} - S_{21}^{*\dagger}\bar{S}_{32} - S_{31}^{*\dagger}\bar{S}_{22} + S_{41}^{*\dagger}\bar{S}_{12}, \\D \equiv \gamma_{3}\bar{S}^{\dagger}\gamma_{3}\bar{S} = \begin{pmatrix} d & -d \\ d & -d \end{pmatrix} \text{ mit } d \in \mathbb{C}^{2\times2}, \qquad (4.68)$$

$$d_{11} = S_{11}^{*\dagger}\bar{S}_{31} - S_{31}^{*\dagger}\bar{S}_{11} + S_{21}^{*\dagger}\bar{S}_{41} + S_{42}^{*\dagger}\bar{S}_{21}, \\d_{21} = -S_{12}^{*\dagger}\bar{S}_{31} + S_{22}^{*\dagger}\bar{S}_{41} + S_{32}^{*\dagger}\bar{S}_{11} + S_{42}^{*\dagger}\bar{S}_{21}, \\d_{12} = (d_{21})^{*\dagger} = -S_{12}S_{31}^{*\dagger} + S_{22}S_{41}^{*\dagger} + S_{32}S_{11}^{*\dagger} + S_{42}S_{21}^{*\dagger}, \\d_{22} = -S_{12}^{*\dagger}\bar{S}_{32} + S_{32}^{*\dagger}\bar{S}_{12} - S_{22}^{*\dagger}\bar{S}_{42} + S_{41}^{*\dagger}\bar{S}_{22}.$$

Nach Summation und einigen Umformungen ist das Resultat für die Vektorstromkorrelationsfunktion

$$k_V(x_0) = \frac{2}{3} \langle \sum_{\mathbf{x}} \operatorname{Re} \operatorname{Tr}[S_{11}^{*\dagger}(2S_{42} - S_{31}) + S_{22}^{*\dagger}(2S_{31} + S_{42}) + S_{21}^{*\dagger}S_{41} + S_{12}^{*\dagger}S_{32}] \rangle_G.$$
(4.69)

Zur Verbesserung von k_V wird später noch die Tensor-Korrelationsfunktion

$$k_T(x_0) \equiv -\frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \sum_{\mathbf{y}, \mathbf{z}} \langle T_{k0}^3(x) \bar{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_k \frac{1}{2} \tau^3 \zeta(\mathbf{z}) \rangle$$
(4.70)

 mit

$$T^{a}_{\mu\nu}(x) = i\overline{\psi}(x)\sigma_{\mu\nu}\frac{1}{2}\tau^{a}\psi(x)$$
(4.71)

benötigt, wobei der Tensor $\sigma_{\mu\nu}$ in (A.11) definiert ist.

4.3.3 Korrelationen zwischen Randfeldern

Wenn man die Korrelationsfunktion zwischen zwei Feldern auf den gegenüberliegenden Randflächen betrachtet, erhält man

$$f_1 \equiv -\frac{1}{3L^6} \sum_{\mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{y}', \mathbf{z}'} \langle \overline{\zeta}'(\mathbf{y}') \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^a \zeta'(\mathbf{z}') \overline{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_5 \frac{1}{2} \tau^a \zeta(\mathbf{z}) \rangle.$$
(4.72)

Die Rand-Rand-Korrelation f_1 trägt keine x_0 -Abhängigkeit und wird zur Normierung abgeleiteter Größen benutzt, insbesondere um die multiplikative Renormierung der Randfelder herauszukürzen.



Abbildung 4.2: Veranschaulichung der Korrelation zwischen Randfeldern im Schrödingerfunktional. Ein Quark-Antiquark-Paar entsteht bei $x_0 = 0$ und propagiert zu $x_0 = T$.

4.3.4 Korrelationsfunktionen mit nichtentarteten Quarkmassen

Die Vorgehensweise, die in den letzten beiden Abschnitten erläutert worden ist, lässt sich auf den Fall nichtentarteter Quarkmassen verallgemeinern. Insbesondere sollen im folgenden Korrelationsfunktionen mit einer leichten Quarkmasse m_l und einer schweren Quarkmasse m_h betrachtet werden.

Mit den Definitionen aus Abschnitt 2.9 und dem Quellterm auf dem Rand $\mathcal{O}^{\pm} = \mathcal{O}^1 \pm i \mathcal{O}^2$ werden Korrelationsfunktionen mit nichtentarteten Quarkmassen definiert.

$$f_A^{ij}(x_0) = -\frac{1}{2} \langle A_0^+(x) \mathcal{O}^- \rangle, \qquad f_P^{ij}(x_0) = -\frac{1}{2} \langle P^+(x) \mathcal{O}^- \rangle$$
(4.73)

 mit

$$\mathcal{O}^{a} = a^{6} \sum_{\mathbf{y},\mathbf{z}} \bar{\zeta}(\mathbf{y}) \gamma_{5} \frac{1}{2} \tau^{a} \zeta(\mathbf{z}).$$
(4.74)

4. Nicht-perturbative Bestimmung von Verbesserungskoeffizienten

Auch für diese Korrelationsfunktionen lässt sich eine nackte Strommasse durch

$$m_{ij} = \frac{\tilde{\partial}_0 f_A^{ij}(x_0) + ac_A \partial_0^* \partial_0 f_P^{ij}(x_0)}{2f_P^{ij}(x_0)}$$
(4.75)

definieren. Die Verallgemeinerung von Gleichung (4.31) lautet

$$m_{ij} = Z \left[\frac{1}{2} (m_{q,i} + m_{q,j}) + \frac{1}{2} b_m \left(a m_{q,i}^2 + a m_{q,j}^2 \right) - \frac{1}{4} (b_A - b_P) a (m_{q,i} + m_{q,j})^2 \right] + \mathcal{O}(a^2) .$$
(4.76)

In der Analyse werden auch PCAC-Massen mit verbesserten Ableitungen betrachtet [37]. Dazu ersetzt man in Gleichung (4.75)

$$\tilde{\partial}_0 \rightarrow \tilde{\partial}_0 \left(1 - \frac{1}{6} a^2 \partial_0^* \partial_0 \right),$$
(4.77)

$$\partial_0^* \partial_0 \to \partial_0^* \partial_0 \left(1 - \frac{1}{12} a^2 \partial_0^* \partial_0 \right).$$
 (4.78)

Diese Verbesserung verkleinert die Fehler der Gitterableitung auf $O(a^4)$.

4.4 Berechnung der Verbesserungskoeffizienten aus den PCAC-Massen

Im Abschnitt 4.1.4 sind die Verbesserungskoeffizienten b_A , b_P und b_m definiert worden. Das Ziel ist im Folgenden, diese Größen aus den grundlegenden Größen, die von der Monte-Carlo-Simulation ausgegeben werden, herzuleiten. Die primären Größen sind hier die Korrelationsfunktionen f_A (4.46) und f_P (4.47). Als erste sekundäre Größe lässt sich die PCAC-Masse m_{ij} (4.75) ableiten, auf die die Verbesserungskoeffizienten zurückgeführt werden sollen.

Um jetzt die Verbesserungskoeffizienten b_m und $b_A - b_P$ sowie die Renormierungskonstante Z zu isolieren, betrachtet man die Kombination

$$2am_{12} - am_{11} - am_{22} = f(am_{q,1}, am_{q,2}), (4.79)$$

die eine analytische Funktion der subtrahierten nackten Quarkmassen ist [27]. Weiterhin ist f symmetrisch bei Austausch der Argumente, f(x, y) = f(y, x), und verschwindet für x = y. Somit kann f in eine Reihe der Form

$$f(x,y) = (x-y)^2 \sum_{n,k=0}^{\infty} c_{nk} (x-y)^{2n} (x+y)^k$$
(4.80)

mit reellen Koeffizienten c_{nk} entwickelt werden. Insbesondere ist

$$c_{00} = Z \frac{1}{2} (b_A - b_P) \tag{4.81}$$

4.4. Berechnung der Verbesserungskoeffizienten aus den PCAC-Massen

bis zu Termen von O(a), die nicht von den Quarkmassen abhängen [27]. Setzt man Gl. (4.76) in die Definition von f ein, ergibt sich

$$f(am_{q,1}, am_{q,2}) = Z \left[am_{q,1} + am_{q,2} + b_m (a^2 m_{q,1}^2 + a^2 m_{q,2}^2) - \frac{1}{2} (b_A - b_P) a^2 (m_{q,1} + m_{q,2})^2 - am_{q,1} - b_m a^2 m_{q,1}^2 + (b_a - b_P) a^2 m_{q,1}^2 - am_{q,2} - b_m a^2 m_{q,2}^2 + (b_A - b_P) a^2 m_{q,2}^2 \right] + O(a^3)$$
$$= \frac{1}{2} Z (b_A - b_P) a^2 (m_{q,1} - m_{q,2})^2 + O(a^3) .$$
(4.82)

Die Bestimmung von $b_A - b_P$ erfordert es nun, die Differenz

$$am_{11} - am_{22} = g(am_{q,1}, am_{q,2}) \tag{4.83}$$

in eine Reihe der Form

$$g(x,y) = (x-y)\sum_{n,k}^{\infty} d_{nk}(x-y)^{2n}(x+y)^k$$
(4.84)

mit $d_{00} = Z$ zu entwickeln. Analog zu Gl. (4.82) erhält man

$$g(am_{q,1}, am_{q,2}) = Z \Big[am_{q,1} + b_m am_{q,1}^2 - (b_A - b_P) am_{q,1}^2 - am_{q,2} + b_m am_{q,2}^2 - (b_A - b_P) am_{q,2}^2 \Big] + O(a^2) = Z \Big[1 + (b_m - b_A + b_P) (am_{q,1} + am_{q,2}) \Big] \times (am_{q,1} - am_{q,2}) + O(a^2).$$
(4.85)

Somit definiert man das Verhältnis

$$R_{AP} \equiv \frac{2(2m_{12} - m_{11} - m_{22})}{(m_{11} - m_{22})(am_{q,1} - am_{q,2})}$$
(4.86)

als eine Abschätzung für den Koeffizienten $b_A - b_P$ bis zu Termen von $O(am_{q,1} + am_{q,2})$ und quarkmassenunabhängige Gitterartefakte von O(a),

$$R_{AP} = \frac{Z(b_A - b_P)a(m_{q,1} - m_{q,2})^2}{Za(m_{q,1} - m_{q,2})^2} + O(a^2), \qquad (4.87)$$

$$R_{AP} = b_A - b_P + \mathcal{O}(am_{q,1} + am_{q,2}).$$
(4.88)

Für die Abschätzung von \boldsymbol{b}_m erweist es sich als nützlich, eine dritte Quarkmasse,

$$m_{q,3} = \frac{1}{2} \left(m_{q,1} + m_{q,2} \right), \qquad (4.89)$$

gegeben durch den Mittelwert der ersten beiden, einzuführen. Mit der gleichen Methode wie vorher lässt sich b_m ausdrücken durch

$$R_m \equiv \frac{4(m_{12} - m_{33})}{(m_{11} - m_{22})(am_{q,1} - am_{q,2})}.$$
(4.90)

Hier gilt für den Zähler

$$4(m_{12} - m_{33}) = Z \left[\frac{1}{2} m_{q,1} + \frac{1}{2} m_{q,2} + \frac{1}{2} b_m a m_{q,1}^2 + \frac{1}{2} b_m a m_{q,2}^2 - \frac{1}{4} (b_A - b_P) a (m_{q,1} + m_{q,2})^2 - m_{q,3} - b_m a m_{q,3}^2 + (b_A - b_P) a m_{q,3}^2 \right] + O(a^2)$$

$$= Z b_m a (m_{q,1} - m_{q,2}) + O(a^2), \qquad (4.91)$$

so dass analog zu $b_A - b_P$ gilt

$$R_m = b_m + \mathcal{O}(am_{q,1} + am_{q,2}).$$
(4.92)

Abschließend lässt sich auch die Renormierungskonstante Z durch

$$R_Z \equiv \frac{m_{11} - m_{22}}{m_{q,1} - m_{q,2}} + (b_A - b_P - b_m)(am_{11} + am_{12})$$
(4.93)

abschätzen. Für die korrekte Wahl von $b_A - b_P - b_m$ gilt nach (4.85)

$$R_Z = Z + \mathcal{O}\left(a^2\right). \tag{4.94}$$

4.5 Numerische Ergebnisse

4.5.1 Strategie

Die Bestimmung der Verbesserungskoeffizienten b_m und $b_A - b_P$ und der Renormierungskonstante Z soll für kleinere Kopplungen als bisher (β zwischen 7.4 und 8.2) bestimmt werden. Die Anwendung auf Systeme mit schweren Quarks benötigt diesen Parameterbereich. In der bisher vorliegenden Arbeit zu den diesen Größen [27] wurde als Renormierungsbedingung L/r_0 konstant gehalten. Der phänomenologische Parameter r_0 [23, 24] ist für die kleinen Kopplungen dieser Arbeit nicht bekannt. Es wäre nötig gewesen, von den existierenden Daten zu extrapolieren, wodurch zusätzliche Unsicherheiten in die Ergebnisse eingebracht worden wären. Deshalb wird in dieser Arbeit eine andere Wahl getroffen. Der Parameter β – und damit auch g_0 – wird so gewählt, dass die renormierte SF-Kopplung auf einem festen Wert

$$\bar{g}^2 = 2.4$$
 (4.95)

gehalten wird. Entlang dieser *Linie konstanter Physik* verläuft die gesamte Rechnung. Beim Festlegen der Werte für β kann auf die bereits erwähnte Arbeit zur Quarkmassen-Renormierung [22] zurückgegriffen werden.

4.5.2 Simulationsparameter

Die Rechnungen werden auf hyperkubischen Gittern der Größe $L^3 \times T$ mit $T = \frac{3}{2}L$ und L/a = 12, 16, 20, 24 und 32 durchgeführt. Das 20er-Gitter muss aufgrund der Maschinentopologie der APEmille-Rechner am DESY Zeuthen zwischen L/a = 16 und L/a = 24 interpoliert werden.

Die verwendete Wirkung ist die mit dem SW-Term verbesserte Wirkung mit Wilson-Fermionen. Die Rechnung verwendet die Valenzquarknäherung. Der in (2.44) definierte Winkel für den Phasenfaktor wird auf $\theta = 0.5$ gesetzt. Der zum Verbesserungsterm gehörige Koeffizient c_{SW} ist in dieser Näherung nichtperturbativ bekannt [17]:

$$c_{\rm SW} = \frac{1 - 0.454g_0^2 - 0.175g_0^4 + 0.012g_0^6 + 0.045g_0^8}{1 - 0.720g_0^2}.$$
 (4.96)

Der rationale Fit durch die numerischen Daten ist für $0 \le g_0 \le 1$ gültig und geht für kleine Kopplungen in die Resultate der Störungstheorie über. Die Verbesserungskoeffizienten, die die Randeffekte kompensieren sollen, werden beide auf ihre störungstheoretischen Ergebnisse gesetzt:

$$c_t(g_0) = 1 - 0.089g_0^2 - 0.030g_0^4, \qquad (4.97)$$

$$\tilde{c}_t(g_0) = 1 - 0.018 g_0^2.$$
 (4.98)

Die Resultate entstammen der ursprünglichen Arbeit zum Schrödingerfunktional der reinen Eichtheorie [1] und einer Zwei-Schleifen-Rechnung zur QCD im SF [36].

Die Simulationen werden bei zwei verschiedenen Parametersätzen durchgeführt. Für das leichte Quark wird jeweils $\kappa = \kappa_c$ gesetzt, so dass die nackte Strommasse Lm_{11} sehr klein bleibt. Sie verschwindet nicht völlig, da die Werte für κ_c , die wiederum [22] entstammen, mit der zeitlichen Ausdehnung T = L und nicht mit $T = \frac{3}{2}L$ gerechnet worden sind.

Beim ersten Datensatz wird κ_h so gesetzt, dass $Lm_{22} \approx 0.45$ ist. Der zweite Datensatz wird mit kleineren κ_h , also einer größeren Masse gerechnet. Hier wird die Strommasse des schweren Quarks auf $Lm_{22} \approx 2.5$ eingestellt.

Um Rundungsfehler zu minimieren, wird der Hopping-Parameter κ_3 , für die dritte zur Berechnung von b_m benötigte Quarkmasse (4.89), intern vom Programm berechnet. Aus dessen Definition,

$$\kappa = \frac{1}{2am_0 + 8},\tag{4.99}$$

folgt mit $m_{0,3} = \frac{1}{2}(m_{0,1} + m_{0,2})$

$$\kappa_3 = \frac{2\kappa_1\kappa_2}{\kappa_1 + \kappa_2}.\tag{4.100}$$

Dies ist im Gegensatz zur ursprünglichen Bestimmung der Verbesserungskoeffizienten [27] möglich, da die jetzt verwendeten APEmille-Rechner über doppelt genaue Fließkomma-Arithmetik verfügen. So ist der Fehler durch das maschinenbedingte Abschneiden von κ_3 zu vernachlässigen.

Set	L/a	Statistik	β	κ_1	am_{11}	Lm_{11}
A_1	12	896	7.4082	0.133961	0.0028(1)	0.0336(7)
B_1	16	393	7.6547	0.133632	0.0010(1)	0.0162(6)
$C_1{}^a$	16	745	7.8439	0.133373	0.0005(1)	0.0084(5)
$C_1{}^b$	24	278	7.8439	0.133373	0.0005(1)	0.0116(6)
D_1	24	321	7.9993	0.133159	0.0004(1)	0.0105(5)
E_1	32	171	8.2415	0.132847	0.0002(1)	0.0079(5)
A_2	12	896	7.4082	0.133961	0.0028(1)	0.0336(7)
B_2	16	393	7.6547	0.133632	0.0010(1)	0.0162(6)
$C_2{}^a$	16	745	7.8439	0.133373	0.0005(1)	0.0084(5)
$C_2{}^b$	24	278	7.8439	0.133373	0.0005(1)	0.0116(6)
D_2	24	321	7.9993	0.133159	0.0004(1)	0.0105(5)
E_2	32	171	8.2415	0.132847	0.0002(1)	0.0079(5)

Tabelle 4.1: Parameter für das leichte Quark

Set	L/a	β	κ_2	am_{22}	Lm_{22}
A_1	12	7.4082	0.132728	0.0398(1)	0.4778(7)
B_1	16	7.6547	0.132711	0.0289(1)	0.4621(7)
C_1^{a}	16	7.8439	0.132440	0.0288(1)	0.4610(5)
$C_1^{\ b}$	24	7.8439	0.132767	0.0189(1)	0.4546(6)
D_1	24	7.9993	0.132553	0.0189(1)	0.4539(5)
E_1	32	8.2415	0.132395	0.0141(1)	0.4508(5)
A_2	12	7.4082	0.126040	0.2258(1)	2.7100(6)
B_2	16	7.6547	0.128028	0.1632(1)	2.6112(6)
$C_2{}^a$	16	7.8439	0.129018	0.1284(1)	2.0537(4)
$C_2^{\ b}$	24	7.8439	0.129018	0.1284(1)	3.0823(5)
D_2	24	7.9993	0.129595	0.1061(1)	2.5456(5)
E_2	32	8.2415	0.130246	0.0782(1)	2.5035(5)

4.5. Numerische Ergebnisse

Tabelle 4.2: Parameter für das schwere Quark

4.5.3 Korrelationsfunktionen

Die grundlegenden Größen, die von dem Simulationsprogramm berechnet werden, sind die Korrelationsfunktionen $f_A(x_0)$ (4.46) und $f_P(x_0)$ (4.47). Sie werden bereits im Programm über das Raumvolumen einer Zeitscheibe gemittelt und fallen exponentiell ab.



Abbildung 4.3: Beispiel für eine Korrelationsfunktion: f_A^{22} , gerechnet mit L/a = 16 und $\kappa_2 = 0.132711$. Die statistischen Fehler sind kleiner als die Symbole. Die Linie dient nur zur Veranschaulichung des funktionalen Verlaufs.

4.5.4 Bestimmung der statistischen Fehler

Die statistische Unsicherheit der Korrelationsfunktionen und der abgeleiteten Größen wird mit einer Jackknife-Analyse bestimmt [11]. Hierfür werden aus den Rohdaten sogenannte Jackknife-Samples erstellt, die die Grundlage für die weitere Datenanalyse bilden. Für einen Datensatz x_1, \ldots, x_n besteht ein Jackknife Sample \tilde{x}_j aus dem Mittelwert der $\{x_i\}_{i\neq j}$. Es gilt also

$$\tilde{x}_j = \frac{1}{n-1} \sum_{\substack{i=1\\i \neq j}}^n x_i.$$
(4.101)

Anstelle der Rohdaten werden jetzt die Jackknife-Samples benutzt, um abgeleitete Größen und deren Fehler zu berechnen. Für eine sekundäre Größe,

$$A_i \equiv A(\tilde{x}_i) \tag{4.102}$$

errechnet sich der Mittelwert \overline{A} über die n Messungen aus

$$\bar{A} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} A_i, \tag{4.103}$$

und der dazugehörige Jackknife-Fehler ΔA aus

$$\Delta A = \sqrt{\frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\bar{A} - A_i)^2}.$$
(4.104)

Der Jackknife-Fehler ist für Analysen von korrelierten Datensätzen verlässlicher als die übliche Standardabweichung. Prinzipiell sind die aufeinander folgenden Daten einer Monte-Carlo-Simulation korreliert. Die Korrelationen nehmen mit wachsender Monte-Carlo-Zeit zwischen den betrachteten Messungen ab. Um zu starke Korrelationen zwischen den einzelnen Messwerten auszuschließen, wird nur bei jedem zwanzigsten Eichfeld-Update eine Messung durchgeführt. So ist sichergestellt, dass der zeitliche Abstand größer ist als die integrierte Autokorrelationszeit, die ein Mass für die Dauer von Korrelationen in MC-Simulationen ist [38]. Alle im Folgenden angeführten Messunsicherheiten sind durch Jackknife-Analysen ermittelt.

4.5.5 PCAC-Massen

Aus den O(a)-verbesserten Korrelationsfunktionen

$$(f_A^{ij})_I(x_0) = f_A^{ij}(x_0) + c_A \tilde{\partial}_0 f_P^{ij}(x_0)$$
(4.105)

erhält man die PCAC-Massen in Abhängigkeit von x_0 durch Gleichung (4.75).

Wie Abbildung 4.4 verdeutlicht, zeigen die Strommassen ein deutliches Plateau im Inneren des betrachteten Volumens. Die in den Tabellen 4.1 und 4.2 angegeben Werte der Massen sind durch Mittelung über das mittlere Drittel des Volumens, also von $\frac{T}{3}$ bis $\frac{2T}{3}$, bestimmt worden.



Abbildung 4.4: PCAC-Massen für L/a = 16, 393 Messungen.

Es hat sich gezeigt, dass die Wahl der Gitterableitung einen großen Einfluss auf die Verbesserungskoeffizienten, insbesondere $b_A - b_P$, hat [27]. Sämtliche bisherigen Ergebnisse für die PCAC-Massen sind mit den verbesserten Gitterableitungen (4.77) gerechnet.

Um zu illustrieren, dass die Simulationen für die gleichen physikalischen Bedingungen durchgeführt werden, wird die dimensionslose PCAC-Masse Lm gegen die Gitterauflösung a/L aufgetragen.



Abbildung 4.5: Die Abbildung zeigt, dass bei *konstanter Physik* gerechnet wurde.Die ausgefüllten Symbole entsprechen den nackten Stromquarkmassen und die leeren den renormierten Quarkmassen.

β	g_0^2	$b_m \ (\text{Set } 1)$	$b_m \text{ (Set 2)}$
7.4082	0.8099	-0.6217(17)	-0.5401(4)
7.6547	0.7838	-0.6218(27)	-0.5621(7)
7.8439	0.7649	-0.6228(28)	-0.5744(9)
7.9993	0.7501	-0.6260(27)	-0.5811(8)
8.2415	0.7280	-0.6312(32)	-0.5927(9)

4.5.6 Resultate für b_m

Tabelle 4.3: Resultate für b_m . Die statistischen Fehler sind beim zweiten Datensatz kleiner, weil er größere Quarkmassen hat, die sich leichter simulieren lassen, da die Propagatoren nicht so stark fluktuieren.

Der Verbesserungskoeffizient für die renormierte Quarkmasse b_m wird nach (4.90) aus den PCAC-Massen bestimmt. Wie erwartet zeigen die beiden Renormierungsbedingungen deutlich unterschiedliche Gittereffekte. Der Einfluss der jeweiligen Gitterableitung auf b_m ist nicht sehr groß. Dennoch stimmen die Ergebnisse nicht innerhalb der Fehler überein. Abbildung 4.7 zeigt die Ergebnisse einer Simulation mit L = 12 und T = 18. Die Parameter sind die dazugehörigen aus dem ersten Datensatz, siehe Tabellen 4.1 und 4.2. Die Differenz der b_m mit den verschiedenen Gitterableitungen ist von der Ordnung aund verschwindet somit im Kontinuumslimes. Für weitere Anwendungen wer-



Abbildung 4.6: Die Quadrate sind die Daten aus [27], die Dreiecke sind der Datensatz mit Lm = 0.45, die Kreise der mit Lm = 2.5. Die durchgezogene Linie ist ein rationaler Fit aus [27], der für kleine Kopplungen gegen das perturbative Ergebnis (gestrichelte Linie) geht.



Abbildung 4.7: b_m als Funktion von x_0 für L/a = 12, 1216 Messungen. Die Quadrate sind mit gewöhnlichen Gitterableitungen (4.13), die Kreise mit verbesserten Ableitungen (4.77) gerechnet.

den ausschließlich die Daten für b_m verwandt, die mit verbesserten Ableitungen gerechnet worden sind.

4.5.7 Resultate für $b_A - b_P$

Die Differenz der Verbesserungskoeffizienten b_A und b_P ist in dem untersuchten Bereich der Kopplung sehr klein. Sie wird nach (4.86) bestimmt. Gerade für Anwendungen mit kleinen Quarkmassen ist der Beitrag durch das Produkt $a(b_A - b_P)m_q$ im Vergleich zu den typischen statistischen Unsicherheiten i.A. vernachlässigbar.

β	g_0^2	$b_A - b_P \ (\text{set } 1)$	$b_A - b_P \ (\text{set } 2)$
7.4082	0.8099	-0.0008(14)	0.0489(3)
7.6547	0.7838	-0.0059(22)	0.0239(5)
7.8439	0.7649	-0.0057(23)	0.0151(6)
7.9993	0.7501	-0.0072(21)	0.0103(5)
8.2415	0.7280	-0.0077(25)	0.0051(6)

Tabelle 4.4: Resultate für $b_A - b_P$. Set 1 ist bereits fast konstant, Set 2 fällt innerhalb des untersuchten Bereichs stark ab.



Abbildung 4.8: Die Quadrate sind die Daten aus [27], die Dreiecke sind der Datensatz mit Lm = 0.45, die Kreise der mit Lm = 2.5.

4.5.8 Resultate für Z

Die Renormierungskonstante Z wird nach (4.93) bestimmt. Hier geht bereits die jeweils richtige Wahl für $b_A - b_P - b_m$ ein. Die relativen statistischen Unsicherheiten sind für diese O(a)-verbesserte Größe deutlich kleiner.

β	g_0^2	Z (set 1)	$Z \ (\text{set } 2)$
7.4082	0.8099	1.0941(3)	1.0855(2)
7.6547	0.7838	1.0916(3)	1.0867(2)
7.8439	0.7649	1.0900(3)	1.0867(2)
7.9993	0.7501	1.0882(2)	1.0859(1)
8.2415	0.7280	1.0859(2)	1.0845(1)

Tabelle 4.5: Resultate für Z. Die Unterschiede der beiden Sets liegen hier nur bei maximal einem Prozent.



Abbildung 4.9: Die Quadrate sind die Daten aus [27], die Dreiecke sind der Datensatz mit Lm = 0.45, die Kreise der mit Lm = 2.5.

4.5.9 Gittereffekte

Vergleich der beiden Datensätze

Aus dem Vergleich der unter den zwei Renormierungsbedingungen $Lm_h = 0.45$ und $Lm_h = 2.5$ gewonnenen Werte für die Größen $b_A - b_P$, b_m und Z lassen sich die Auswirkungen der Gitterdiskretisierung abschätzen. Die Gitterartefakte sind für $b_A - b_P$ und b_m proportional zur Gitterauflösung a/L. Für Z haben sie nur $O(a^2)$ für die richtige Wahl der vorher berechneten Verbesserungskoeffizienten.



Abbildung 4.10: R_m (set 1) - R_m (set 2) gegen a/L

Um den Effekt sichtbar zu machen, trägt man die Differenz der beiden Datensätze gegen a/L, bzw. gegen $(a/L)^2$ auf. Der Graph in 4.10 zeigt für b_m zwar das erwartete Verhalten für a gegen null. Die Differenz der Sets wird klein, auch wenn sie nicht streng linear gegen Null geht. Im nächsten Diagramm 4.11 zeigt sich für $b_A - b_P$ ein ähnliches Verhalten.



Abbildung 4.11: R_{AP} (set 1) - R_{AP} (set 2) gegen a/L

Für Z ist in Abbildung 4.12 schließlich ein lineares Verhalten in $(a/L)^2$ zu erkennen, wie es für eine O(a)-verbesserte Größe zu erwarten ist.



Abbildung 4.12: Z (set 1) – Z (set 2) gegen $(a/L)^2$

Vergleich der verschiedenen Gitterableitungen

Eine weitere Möglichkeit den Einfluss der Gitterartefakte abzuschätzen ist der Vergleich der Standardgitterableitung (4.13) mit der verbesserten Gitterableitung (4.77). Auch hier sollten im Kontinuumslimes die gleichen Ergebnisse herauskommen. Da der Effekt für b_m und Z sehr klein ist, betrachte ich hier nur $b_A - b_P$. Für beide Datensätze wird jeweils

$$\Delta R_{AP} = R_{AP} (\text{std. Abl.}) - R_{AP} (\text{verb. Abl.})$$
(4.106)

gegen a/L aufgetragen. An der größeren Steigung für Set 2 werden die stärkeren



Abbildung 4.13: ΔR_{AP} . Die Kreise entsprechen dem ersten Datensatz, die Quadrate dem zweiten. Im Kontinuumslimes verschwinden beide Differenzen.

Gitterartefakte bei größeren Quarkmassen deutlich. Das Verhalten ist für beide Datensätze in guter Näherung linear und ΔR_{AP} verschwindet für $a/L \rightarrow 0$. Somit ist die O(a)-Verbesserung der Theorie inklusive der Wahl der Koeffizienten c_A und c_{sw} korrekt vorgenommen worden.

4.5.10 Universalität des Kontinuumslimes einer geeigneten Observablen

Die bisher erzielten Ergebnisse liegen für zwei verschiedene Renormierungsbedingungen — $Lm_{22} = 0.45$ und $Lm_{22} = 2.5$ — vor. Wie im vorangegangen Abschnitt gezeigt, unterscheiden sich die Werte für die Verbesserungskoeffizienten um Terme der Ordnung *a*. Um die Konsistenz dieses Verfahrens zu illustrieren, wird eine geeignete Observable mit beiden Resultaten für b_m und *Z* berechnet. Dazu wird eine effektive Masse bestimmt, die aus dem exponentiellen Abfall der verbesserten Korrelationsfunktion f_A resultiert. Die Größe $\Gamma^{\rm rel}$, die bereits in (3.18) definiert worden ist, wird für einen festen Wert der Quarkmasse (z = 9.0) ermittelt, in dessen Festlegung die beiden Datensätze für b_m und *Z* eingehen.

	$L imes \Gamma^{ m rel}$					
					$a \to 0$	
Set 1	7.022(4)	6.553(5)	6.386(8)	6.335(8)	6.258(9)	
Set 2	6.639(2)	6.436(4)	6.347(8)	6.273(15)	6.254(12)	

Tabelle 4.6: Vergleich von $L \times \Gamma^{\text{rel}}$ für die beiden Datensätze. Die letzte Spalte enthält den Kontinuumslimes, für dessen Bestimmung die drei Punkte B, D und E verwendet worden sind.



Abbildung 4.14: $L \times \Gamma^{\text{rel}}$ gegen $(a/L)^2$ für z = 9.0. Die Kreise sind mit dem ersten Datensatz für b_m und Z bestimmt worden, die Quadrate mit dem zweiten.

Die Kontinuumsextrapolationen für $\Gamma^{\rm rel}(z = 9.0)$ stimmen im Rahmen der Fehler überein. Für die anschließende Bestimmung von $\Gamma^{\rm rel}$ in Kapitel 5 wird durchgehend der erste Datensatz für b_m (Tabelle 4.3) und Z (Tabelle 4.5) verwendet. Da die Unterschiede der beiden Datensätze im Kontinuum verschwinden, ist dies legitim. Die gewählten Renormierungsbedingungen legen b_m und Z nur bis auf Gittereffekte fest, die aber im Kontinuumslimes der Größen, in die sie eingehen, verschwinden. 4. Nicht-perturbative Bestimmung von Verbesserungskoeffizienten

Kapitel 5

Nicht-perturbative Bestimmung von Observablen in Abhängigkeit von der Quarkmasse

Die effektive Masse Γ^{rel} (3.18), die aus dem Abfall der Korrelationsfunktion f_A (4.46) bestimmt wird, wird in diesem Kapitel nicht-perturbativ bestimmt. Das grundlegende Vorgehen ist bereits in Kapitel 3 dargelegt worden.

5.1 Weitere Observable

Im Rahmen der HQET ist es von Interesse, bestimmte Verhältnisse von Korrelationsfunktionen mit Resultaten der QCD zu vergleichen. Ein perturbativer Ansatz findet sich in [39].

Eine dort untersuchte Observable ist das Verhältnis der Korrelationsfunktion des Axialstroms und der Rand-Rand-Korrelation f_1 . Aus Dimensionsgründen muss hier die Wurzel von f_1 eingehen. Man definiert

$$Y_I \equiv \frac{f_A^I(T/2)}{\sqrt{f_1}},$$
 (5.1)

mit f_A^I , das in Gl. (4.105), und f_1 , das in Gl. (4.72) gegeben ist. Auch hier muss, um einen Vergleich zu ermöglichen, die renormierte Größe

$$Y_R = Z_A (1 + \frac{1}{2}ab_A m_{q,h}) Y_I$$
(5.2)

betrachtet werden. Der Faktor $\frac{1}{2}$ vor dem Verbesserungskoeffizienten b_A tritt auf, weil Korrelationsfunktionen mit nicht-entarteten Quarkmassen untersucht

5. Nicht-perturbative Bestimmung von Observablen in Abhängigkeit von der Quarkmasse

werden, siehe Abschnitt 4.3.4. Die leichte Quarkmasse verschwindet wegen $\kappa_l = \kappa_c$. Das so definierte Y_R soll später mit seinem Analogon aus der statischen Theorie X aus [39] verglichen werden.

Daneben wird noch das Verhältnis von Axialvektorstrom- zu Vektorstromkorrelation betrachtet. Hier wird

$$R_{I} \equiv \frac{f_{A}^{I}(T/2)}{k_{V}^{I}(T/2)}$$
(5.3)

definiert. Die Vektorstromkorrelationsfunktion k_V ist in (4.64) gegeben. Sie wird mit k_T (4.70) verbessert:

$$k_V^I(x_0) = k_V(x_0) + c_V \tilde{\partial}_0 k_T(x_0).$$
(5.4)

Der zugehörige Verbesserungskoeffizient c_V ist ebenfalls nicht-perturbativ bestimmt worden [40]. Die Renormierung erfolgt separat für Zähler und Nenner,

$$R_R = \frac{Z_A(1 + \frac{1}{2}ab_A m_{q,h})}{Z_V(1 + \frac{1}{2}ab_V m_{q,h})} \cdot \frac{f_A^I(T/2)}{k_V^I(T/2)}.$$
(5.5)

Der Kontinuumslimes der so definierten Größen Y_R und R_R soll in Abhängigkeit von der Quarkmasse betrachtet werden. Über die Renormierungsbedingung z = konstant (3.25) werden die Quotienten analog zu Γ^{rel} quarkmassenabhängig. Im Grenzfall beliebig großer Quarkmassen $(z \to \infty)$ ist zu erwarten, dass der Betrag von R_R gegen Eins geht, da im statischen Limes aufgrund der Spin-Symmetrie schwerer Quarks Vektor- und Axialvektorstrom gleich werden.

5.2 Numerische Simulation

Die einzige Änderung im Code zur vorherigen Bestimmung der Verbesserungskoeffizienten (Kap.4) liegt in der Messroutine. Es werden jetzt auch die Vektorstromkorrelationsfunktionen k_V (4.64) und die für die Verbesserung von k_V benötigte Korrelationsfunktion k_T berechnet. Mit der symmetrisierten Gitterableitung (4.13) ergibt sich für Γ^{rel} der Ausdruck

$$\Gamma^{\rm rel} = \frac{1}{2a} \left[\ln f_A^I(\frac{L}{2} - a) - \ln f_A^I(\frac{L}{2} + a) \right].$$
(5.6)

Alternativ kann $\Gamma^{\rm rel}$ auch über die logarithmische Ableitung bestimmt werden,

$$\Gamma^{\rm rel} = \frac{1}{2a} \left[f_A^I(\frac{L}{2} - a) - f_A^I(\frac{L}{2} + a) \right] \Big/ f_A^I(\frac{L}{2}).$$
(5.7)

Beide Methoden der Berechnung unterscheiden sich um $O(a^2)$ -Gittereffekte, da sie aus der O(a)-verbesserten Größe f_A^I abgeleitet sind, und sollten den gleichen Kontinuumslimes besitzen.

5.2.1 Simulationsparameter

Die Gitterausdehnung wird symmetrisch in Raum und Zeit gewählt, T = L. Das leichte Quark wird erneut mit κ_c aus [22] gerechnet. Der Faktor Z_P zur Renormierung der pseudoskalaren Dichte stammt aus [51]. Z_m und Z_M ergeben sich aus der in Abschnitt 4.5.8 bestimmten Renormierungskonstante Z durch

$$Z_m(g_0) = \frac{Z_A(g_0)Z(g_0)}{Z_P(g_0)},$$
(5.8)

mit Z_A , das aus der Fitfunktion aus [32] entnommen ist. Nach (3.26) wird für die Bestimmung von Z_M noch die Step-Scaling-Funktion σ_P benötigt, siehe Abschnitt 2.3. Die numerischen Werte für σ_P bei den jeweiligen SF-Kopplungen sind in [22] veröffentlicht.

Set	L/a	Statistik	β	κ_l	Z_P	Z_m	Z_M
Α	12	960	7.4082	0.133961	0.6764	1.4014	2.1457
В	16	617	7.6547	0.133632	0.6713	1.4205	2.1749
D	24	209	7.9993	0.133159	0.6632	1.4476	2.2164
Е	32	162	8.2415	0.132847	0.6575	1.4659	2.2444

Tabelle 5.1: Parameter für den leichten Quarksektor

5. Nicht-perturbative Bestimmung von Observablen in Abhängigkeit von der Quarkmasse

Für das schwere Quark werden vier verschiedene Hopping-Parameter simultan gerechnet. Die Werte von κ_h sind so gewählt, dass die dimensionslose renormierte Quarkmasse $z = LM_h$ die Werte 5.15, 6.0, 6.6 und 9.0 annimmt. Diese Vorgabe erweist sich im Zusammenhang mit der Bestimmung der b-Quark-Masse als zweckmäßig [50]. Bei gegebenem L und Z_M lässt sich κ_h so aus (3.25) berechnen. Im ersten Schritt ergibt sich \tilde{m}_q und mit deren Definition (4.24) – bei gegebenem κ_c – dann κ_h . Hier geht über $\tilde{m}_q = (1 + ab_m m_q)m_q$ der in Abschnitt 4.5.6 angegebene Verbesserungskoeffizient b_m ein. Die erneute Berechnung von b_m und Z war nötig, um die Fehler der zu κ_h gehörigen Werte von z, das später als Argument der untersuchten Größen auftritt, zu reduzieren [6].

Set	L/a	β	κ_l	$a\widetilde{m}_{q,h}$	$am_{q,h}$	κ_h	
	z = 5.15						
А	12	7.4082	0.133961	0.2000	0.2341	0.126055	
В	16	7.6547	0.133632	0.1480	0.1649	0.127991	
D	24	7.9993	0.133159	0.0968	0.1035	0.129586	
Е	32	8.2415	0.132847	0.0717	0.0753	0.130242	
	•		z = 6	5.0			
А	12	7.4082	0.133961	0.2330	0.2827	0.124528	
В	16	7.6547	0.133632	0.1724	0.1964	0.126967	
D	24	7.9993	0.133159	0.1128	0.1221	0.128964	
Е	32	8.2415	0.132847	0.0835	0.0885	0.129796	
			z = 6	5.6			
Α	12	7.4082	0.133961	0.2563	0.3200	0.123383	
В	16	7.6547	0.133632	0.1897	0.2197	0.126222	
D	24	7.9993	0.133159	0.1241	0.1356	0.128518	
Е	32	8.2415	0.132847	0.0919	0.0980	0.129477	
			z = 9	0.0			
Α	12	7.4082	0.133961	0.3495	0.5134	0.117762	
В	16	7.6547	0.133632	0.2586	0.3238	0.122987	
D	24	7.9993	0.133159	0.1692	0.1924	0.126670	
Е	32	8.2415	0.132847	0.1253	0.1372	0.128175	

Tabelle 5.2: Parameter für den Sektor der schweren Quarkmasse

5.2.2 Fehlerabschätzung für z bei gegebenem κ_h

Die Werte für κ_h bei gegebenem z (Tabelle 5.2) sind nach (3.37) berechnet worden. Der Fehler für z ergibt sich nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz aus den Fehlern der Größen, von denen z abhängt (3.39). Die Unsicherheiten für Z (Tabelle 4.5) und b_m (Tabelle 4.3) sind in Kapitel 4 neu bestimmt worden. Für die übrigen Größen werden folgende Unsicherheiten angenommen: $\Delta Z_A/Z_A =$ 0.4%, $\Delta Z_P/Z_P = 0.1 - 0.2\%$, $\Delta h/h = 0.9\%$. Die verbleibende Unsicherheit

z	Δz
5.150	0.052
6.000	0.060
6.600	0.066
9.000	0.091

Tabelle 5.3: Die resultierende Unsicherheit in z durch Fehlerfortpflanzung. Die relativen Fehler liegen sämtlich knapp über 1.0%.

von z wird von den Fehlern der Bestimmung der Renormierungskonstante des Axialvektorstroms Z_A und des Faktors h dominiert.

Die Größen, die in Abhängigkeit von z bestimmt werden, erhalten durch diese Unsicherheit einen zusätzlichen Fehler. Für eine Funktion X(z) errechnet sich der zusätzliche Fehler durch

$$\Delta X = \left| \frac{\partial X}{\partial z} \right| \Delta z. \tag{5.9}$$

Die Abschätzung des Fehlers für z (einschließlich des Beitrags des Faktors h, welcher bereits ein Kontinuumsresultat darstellt) wird später bei den Endresultaten zu berücksichtigen sein.

5.2.3 Resultate für $\Gamma^{\rm rel}$

Die in (3.18) definierte Größe $\Gamma^{\rm rel}$ wird nach (5.6) berechnet. Für den Kontinuumslimes wurden nur die drei größeren Gitter mit L/a = 16,24 und 32 betrachtet. Das kleine Gitter mir L/a = 12 zeigt deutliche quarkmassenabhängige Gitterartefakte und wird deshalb für die Kontinuumsextrapolation weggelassen. Das Verhalten der Mittelwerte und Unsicherheiten der Extrapolation wird in Abschnitt 5.2.4 genauer untersucht. Der Fit, mit dem der Kontinuumslimes numerisch bestimmt wird, wird mit der Methode der kleinsten quadratischen Abweichung (*least square fit*) durchgeführt [41]. Dies gilt für alle Extrapolationen des Abschnitts.

	$L\Gamma^{ m rel}$					
z	А	В	D	Е	$a \rightarrow 0$	
5.15	4.025(4)	3.947(4)	3.924(7)	3.903(8)	3.895(8)	
6.0	4.619(4)	4.512(4)	4.474(7)	4.451(8)	4.435(9)	
6.6	5.049(4)	4.911(5)	4.859(7)	4.833(8)	4.811(9)	
9.0	7.022(4)	6.553(5)	6.386(8)	6.335(8)	6.258(9)	

Tabelle 5.4: Ergebnisse für $L\times\Gamma^{\rm rel},$ die Spalte " $a\to 0$ " enthält den Kontinuumslimes.



Abbildung 5.1: $L\Gamma$ gegen $(a/L)^2$. Die ausgefüllten Symbole entsprechen den Daten für L/a = 12,16,24 und 32. Die Kurve ist ein linearer Fit in $(a/L)^2$, bei dem L/a = 12 ausgelassen wurde. Die leeren Symbole sind der Kontinuumslimes. Die Fehler sind kleiner als die Symbole.

Die Gittereffekte sind linear in $(a/L)^2$. Die Steigung der Kurven nimmt mit wachsendem z zu, man beachte die verschiedenen Maßstäbe der Ordinatenachse. Die verbleibenden Gitterartefakte nehmen — wie zu erwarten — mit der Quarkmasse zu.

Die Abhängigkeit von $\Gamma^{\rm rel}$ von der Quarkmasse lässt sich jetzt aus den extrapolierten Resultaten ablesen. Um sie zu verdeutlichen, trägt man die im Kontinuumslimes für $L\Gamma$ gewonnenen Werte gegen z auf. In Diagramm 5.2 sieht man, dass die z-Abhängigkeit über den untersuchten Parameterbereich in guter Näherung linear ist.

z	5.15	6.0	6.6	9.0
$L\Gamma^{ ext{rel}}(z)$	3.895(8)(25)	4.435(9)(29)	4.811(9)(33)	6.258(9)(47)

Tabelle 5.5: Kontinuumslimes von $L\Gamma$ in Abhängigkeit von z. Der erste Fehler ist der statistische, der zweite, deutlich größere, resultiert aus der Unsicherheit in z, vergleiche Abschnitt 5.2.2.



Abbildung 5.2: Der Kontinuumslimes von $L\Gamma$ als Funktion von z. Die Kurve ist ein linearer Fit durch die Datenpunkte und genügt der Gleichung $\Gamma_{\rm fit}^{\rm rel}(z) = 0.755(21) + 0.612(3) \cdot z$.

	Kontinuumslimes von $L\Gamma^{\rm rel}$			
z	3-Punkte-Fit	2-Punkte-Fit		
5.15	3.895(8)	3.877(20)		
6.0	4.435(9)	4.420(20)		
6.6	4.811(9)	4.800(21)		
9.0	6.258(9)	6.270(22)		

5.2.4 Untersuchung der Kontinuumsextrapolation für Γ^{rel}

Tabelle 5.6: Vergleich der Extrapolationen aus 3 bzw. 2 Punkten

In der Kontinuumsextrapolation (Tabelle 5.4) wurde bisher der Datenpunkt bei L/a = 12 weggelassen, da er quarkmassenabhängige Gitterartefakte zeigt. Im Folgenden wird die Abhängigkeit der Extrapolation von der Anzahl der weggelassenen Datenpunkte untersucht. Hierzu wird die Extrapolation mit nur zwei Datenpunkten (L/a = 24, 32) wiederholt, und die Ergebnisse werden für alle vier z-Werte verglichen.

Die Werte stimmen innerhalb der Fehler überein. Der Effekt auf die Mittelwerte des Kontinuumslimes ist also gering. Trotzdem ist es wünschenswert, in Zukunft der Rechnung einen weiteren Datenpunkt bei L/a = 20 hinzuzufügen.



Abbildung 5.3: $L\Gamma^{\text{rel}}$ gegen $(a/L)^2$ für Werte z = 5.15, 6.0, 6.6, 9.0. Die schwarzen Quadrate entsprechen den Daten aus Tabelle 5.4. Die rote Kurve ist der Fit durch zwei Punkte, die blaue der durch drei.
5.2.5 Vergleich mit anderer Definition von Γ^{rel} auf dem Gitter

Neben der bisher verwandten Darstellung für Γ^{rel} auf dem Gitter (5.6) als symmetrisierte Gitterableitung des Logarithmus von f_A^I ist auch eine zweite Darstellung mit Hilfe der logarithmischen (Gitter-)Ableitung möglich (5.7). Um Gitterartefakte in den Ergebnissen für Γ^{rel} zu untersuchen, wird die Differenz der beiden Formen betrachtet. Die Extrapolation der Differenz der beiden

	$L imes \Delta \Gamma^{ m rel}$				
z	А	В	D	Е	$a \to 0$
5.15	-0.0951(7)	-0.0511(5)	-0.0227(5)	-0.0128(3)	-0.0001(4)
6.0	-0.1361(8)	-0.0721(6)	-0.0317(5)	-0.0178(4)	0.0003(5)
6.6	-0.1729(9)	-0.0903(7)	-0.0394(6)	-0.0221(4)	0.0008(5)
9.0	-0.4361(13)	-0.2006(9)	-0.0831(8)	-0.0459(5)	0.0063(7)

Tabelle 5.7: Differenz der beiden Gitterdarstellungen von Γ^{rel} . Für den Kontinuumslimes $(a \to 0)$ wurde der Datenpunkt A (L/a = 12) ausgelassen.



Abbildung 5.4: $L \times \Delta \Gamma^{\text{rel}}$ gegen $(a/L)^2$ für Werte z = 5.15, 6.0, 6.6, 9.0. Die ausgefüllten Symbole entsprechen den numerischen Daten, die leeren Symbole der Kontinuumsextrapolation. Die Unsicherheiten liegen innerhalb der Symbole.

Gitterdarstellungen zeigt, dass die Gitterartefakte in der Berechnung von Γ^{rel} nur von der Ordnung a^2 sind, und dass die beiden Berechnungsvorschriften im Kontinuumslimes zum selben Resultat führen.

5.2.6 Resultate für Y_R

Der Quotient Y_R (5.2) wird aus den Daten der Monte-Carlo-Simulation berechnet. Für Z_A wird erneut die Fitfunktion aus [32] benutzt. Der Verbesserungskoeffizient b_A^{-1} ist mit Methoden der Störungstheorie bestimmt worden; die verwendeten Werte stammen aus [43]. Die in Tabelle 5.8 angegebenen Fehler sind durch eine Jackknife-Analyse ermittelt worden.

	Y_R				
z	А	В	D	Е	$a \to 0$
5.15	-1.438(6)	-1.438(6)	-1.435(6)	-1.436(6)	-1.434(7)
6.0	-1.465(6)	-1.462(6)	-1.458(6)	-1.458(6)	-1.457(7)
6.6	-1.483(6)	-1.477(6)	-1.473(6)	-1.472(6)	-1.470(7)
9.0	-1.556(6)	-1.530(6)	-1.519(6)	-1.517(6)	-1.512(7)

Tabelle 5.8: Resultate für Y_R . Die Spalte " $a \to 0$ " enthält den Kontinuumslimes.



Abbildung 5.5: Y_R gegen $(a/L)^2$. Die ausgefüllten Symbole entsprechen den numerischen Daten. Die Kurve ist ein Fit durch die Daten für L/a = 16, 24 und 32. Die leeren Symbole sind der Kontinuumslimes.

¹Der Einfluss der Wahl von b_A auf Y_R und R_R ist u.U bei großen Quarkmassen nicht vernachlässigbar.

5.2.7 Resultate für R_R

Das in (5.5) definierte, renormierte, verbesserte Verhältnis der Korrelationsfunktionen f_A und k_V wird aus den Rohdaten errechnet. Die Renormierungskonstante Z_V sowie der Verbesserungskoeffizient b_V werden der gleichen Arbeit wie Z_A entnommen [32]. Die Unsicherheiten in Tabelle 5.9 sind wiederum Jackknife-Fehler.

	R_R				
z	А	В	D	Е	$a \to 0$
5.15	-0.899(5)	-0.905(5)	-0.907(5)	-0.909(5)	-0.910(6)
6.0	-0.907(5)	-0.914(5)	-0.917(5)	-0.919(5)	-0.921(6)
6.6	-0.912(5)	-0.919(5)	-0.923(5)	-0.926(5)	-0.927(6)
9.0	-0.924(5)	-0.934(5)	-0.940(5)	-0.944(5)	-0.946(6)

Tabelle 5.9: Resultate für R_R . Die Spalte " $a \to 0$ " enthält den Kontinuumslimes.



Abbildung 5.6: R_R gegen $(a/L)^2$.Die ausgefüllten Symbole entsprechen den numerischen Daten. Die Kurve ist ein Fit durch die Daten für L/a = 16, 24 und 32. Die leeren Symbole sind der Kontinuumslimes.

5.3 Untersuchung des Limes $z \to \infty$ der Observablen

5.3.1 Y_R und R_R

Die im Kontinuumslimes $(a \to 0)$ gewonnenen Werte für Y_R und R_R sind von $z = LM_Q$ abhängig. Trägt man jetzt die Resultate der vorangegangenen Abschnitte gegen 1/z auf, lässt sich der Grenzwert unendlich großer Quarkmasse $z \to \infty$ durch die Extrapolation zu $1/z \to 0$ erreichen. Da die Steigung der beiden Größen wesentlich geringer ist als die von Γ^{rel} , ist der Fehler durch die Unsicherheit in z eine Größenordnung kleiner als der statistische Fehler und somit vernachlässigbar.

z	5.15	6.0	6.6	9.0	$z \to \infty$
$Y_R(z)$	-1.434(7)	-1.457(7)	-1.470(7)	-1.512(7)	-1.614(20)
$R_R(z)$	-0.910(6)	-0.921(6)	-0.927(6)	-0.946(6)	-0.994(16)

Tabelle 5.10: Kontinuumslimes von Y_R und R_R in Abhängigkeit von z.



Abbildung 5.7: Der Kontinuumslimes von Y_R wird gegen 1/z aufgetragen. Die Kurve ist ein Fit durch die vier Datenpunkte (ausgefüllte Symbole).

5.3.2 Differenz der pseudoskalaren und vektoriellen effektiven Massen

Die effektive Masse Γ^{rel} (= Γ_{PS}), die aus der Korrelationsfunktion f_A nach (3.18) bestimmt wird, soll mit einer analogen Größe, die aus der Korrelations-



Abbildung 5.8: $R_R = (f_A^I/k_V^I)_R$ gegen 1/z.

funktion k_V hervorgeht, verglichen werden. Man definiert

$$\Gamma_V \equiv -\tilde{\partial}_0 \ln[k_V^I(x_0)] \bigg|_{x_0 = \frac{L}{2}}$$
(5.10)

als effektive Masse für die Vektorstromkorrelationsfunktion. Untersucht wird die Abhängigkeit der Differenz

$$L \ \Delta \ \Gamma \equiv L(\Gamma_{PS} - \Gamma_V) \tag{5.11}$$

von der dimensionslosen Quarkmasse z und der Limes $z \to \infty$ (bzw. $1/z \to 0$). Die Differenz $\Delta\Gamma$ verschwindet im Limes $1/z \to 0$, bzw. ist bei endlichem M_Q von $O(1/M_Q)$. Wie schon zuvor bei den Resultaten für R_R erwähnt, gilt im statischen Limes die sogenannte *Spin-Symmetrie* schwerer Quarks. Das Verschwinden der Differenz bestätigt also erneut die Vorhersage der statischen Theorie.

		$L \times (\Gamma_{PS} - \Gamma_V)$					
Set	L/a	z = 5.15	z = 6.0	z = 6.6	z = 9.0		
А	12	-0.315(3)	-0.269(2)	-0.243(2)	-0.166(2)		
В	16	-0.323(3)	-0.279(3)	-0.253(3)	-0.184(2)		
D	24	-0.332(6)	-0.286(6)	-0.261(5)	-0.192(4)		
Е	32	-0.341(7)	-0.295(6)	-0.269(6)	-0.199(5)		
$a \rightarrow 0$		-0.344(7)	-0.298(7)	-0.272(6)	-0.202(5)		

Tabelle 5.11: $L\Delta\Gamma$ für die verschiedenen z-Werte. Die letzte Zeile enthält die Kontinuumsextrapolation.

5. Nicht-perturbative Bestimmung von Observablen in Abhängigkeit von der Quarkmasse

z	5.15	6.0	6.6	9.0	$z \to \infty$
$L\Delta\Gamma(z)$	-0.344(7)	-0.298(7)	-0.272(6)	-0.202(5)	-0.012(16)

Tabelle 5.12: Kontinuum
slimes von $L\Delta\Gamma$ in Abhängigkeit von z.



Abbildung 5.9: $L\Delta\Gamma$ gegen 1/z.

5.4 Vergleich mit Größen aus der statischen Theorie

Die statische Theorie verfügt nicht über die chirale Symmetrie der vollen QCD, siehe Abschnitt 3.2.2. Die Renormierung z.B. des Axialvektorstroms wird dann aber *skalenabhängig* aufgrund der fehlenden chiralen Ward-Identitäten. Die Renormierungskonstante Z_A^{stat} hängt von der gewählten Energieskala μ ab:

$$(A_0^{\rm stat})_R = Z_A^{\rm stat}(\mu) A_0^{\rm stat}, \tag{5.12}$$

mit dem statischen Axialvektorstrom A_0^{stat} (3.19). Deshalb wird bei der nichtperturbativen Bestimmung von Z_A^{stat} [51] eine skalenabhängige Funktion C definiert, mit der eine RGI-Größe, die in der statischen Theorie bestimmt wurde, in eine Größe der vollen QCD bei einer bestimmten hochenergetischen Skala umgerechnet werden kann. In der Notation von [51] ist die Funktion für den Axialvektorstrom \widehat{C}_{PS} durch

$$\widehat{C}_{\rm PS} = \left[2b_0 \bar{g}(\mu)^2 \right]^{\gamma_0/2b_0} \exp\left\{ \int_0^{\bar{g}(\mu)} \mathrm{d}g \left[\frac{\gamma(g)}{\beta(g)} - \frac{\gamma_0}{b_0 g} \right] \right\}$$
(5.13)

gegeben. Für $\mu = M_b$ kann \hat{C}_{PS} in Störungstheorie berechnet werden.

Für eine Observable Φ kann das Argument von C_{Φ} so gewählt werden, dass C_{Φ} nur von der RGI-Quarkmasse in in Einheiten des Λ -Parameters abhängt. Die Relation, die es erlaubt die Resultate beider Theorien zu vergleichen lautet somit:

$$\Phi_{\rm QCD} = C_{\Phi} \left(\frac{M_Q}{\Lambda_{\rm \overline{MS}}}\right) \times \Phi_{\rm RG1}^{\rm stat} + O\left(\frac{1}{M_Q}\right).$$
(5.14)

Umgekehrt setzt man jetzt die Resultate für Y_R und R_R mit den vergleichbaren Größen in der statischen Theorie bei einer bestimmten Energieskala in Beziehung. Dafür werden beide Größen durch ihre C-Funktionen $C_{\rm PS}$ bzw. $C_R \equiv C_{PS/V}$ bei der jeweiligen RGI-Quarkmasse $M = z/L_0$ geteilt.



Abbildung 5.10: Y_R/C_{PS} gegen 1/z.



Abbildung 5.11: R_R/C_R gegen 1/z.

Die Diagramme enthalten zum Vergleich auch die statischen Ergebnisse aus

5. Nicht-perturbative Bestimmung von Observablen in Abhängigkeit von der Quarkmasse

[51]. Es ist möglich, innerhalb der Fehler linear in 1/z von den relativistischen Daten zum statischen Limes zu extrapolieren. Die Resultate der QCD im kleinen Volumen bestätigen also die statische Theorie.

Zudem lässt sich eine vorläufige quantitative Abschätzung der 1/*M*–Effekte erreichen, was nicht-perturbativ bislang noch nicht gemacht wurde. Bei $z = L_0 M_b \approx 6.33$ betragen die Korrekturen etwa 8% für Y_R und 12% für R_R .

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Größen nicht-perturbativ bestimmt, die dazu geeignet sind, ein Matching zwischen der QCD und einer effektive Theorie, der HQET, durchzuführen. Insbesondere fließt eine Größe, $\Gamma^{\rm rel}$, direkt in die Bestimmung der b-Quark-Masse nach [25] ein.

Für die Rechnungen im Rahmen der QCD wird das Schrödingerfunktional (SF), ein endliches Volumen-Schema, als Renormierungsschema verwendet. Die effektive Masse Γ^{rel} wird im SF aus der Korrelationsfunktion des Axialvektorstroms nicht-perturbativ mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen bestimmt. Den Rechnungen liegt immer die Valenzquark-Näherung zugrunde, die Effekte durch Quark-Antiquark-Erzeugung vernachlässigt.

Da die Quarkmassen-Abhängigkeit der Observablen untersucht werden soll, wird die RGI-Quarkmasse für die jeweiligen Simulationen auf einem Wert festgehalten. Dazu ist es notwendig, diese Bedingung in die nackten Parameter, die direkt in die Rechnung eingehen, umzurechnen. Hier gehen zwei Größen ein, für die bisher keine ausreichend genauen Resultate im relevanten Parameterbereich vorlagen: Der Verbesserungskoeffizient der renormierten Quarkmasse b_m und die Renormierungskonstante Z, in die die Renormierungskonstanten des Axialvektorstroms (Z_A) , der pseudoskalaren Dichte (Z_P) und der Quarkmasse (Z_m) eingehen. Deshalb werden zuerst b_m und Z in einer separaten MC-Simulation präzise bestimmt. Die Ergebnisse für b_m und Z gehen direkt in die nachfolgenden Rechnungen ein.

β	g_0^2	b_m	Z
7.4082	0.8099	-0.6217(17)	1.0941(3)
7.6547	0.7838	-0.6218(27)	1.0916(3)
7.8439	0.7649	-0.6228(28)	1.0900(3)
7.9993	0.7501	-0.6260(27)	1.0882(2)
8.2415	0.7280	-0.6312(32)	1.0859(2)

Tabelle 6.1: Resultate für b_m und Z.

Die Bestimmung von Γ^{rel} erfolgt durch Rechnung bei verschiedenen festen Werten für $z = LM_h$, so dass man schließlich Γ^{rel} als Funktion der Quarkmasse erhält. Aus den Datenpunkten für L/a = 16, 24 und 32 wird zum Kontinuum extrapoliert.

z	$L \Gamma^{ m rel}$
5.15	3.895(8)(25)
6.0	4.435(9)(29)
6.6	4.811(9)(33)
9.0	6.258(9)(47)

Tabelle 6.2: Ergebnisse für $L \times \Gamma^{\text{rel}}$ im Kontinuumslimes.

Neben Γ^{rel} werden auch noch zwei weitere interessante Observable betrachtet. Y wird aus der Korrelationsfunktion des Axialvektorstroms gebildet, die zur Normierung durch die Wurzel der Rand-Rand-Korrelation f_1 geteilt wird. Rist das Verhältnis von Axial- und Vektorstromkorrelationsfunktion. Die jeweiligen renormierten Größen Y_R und R_R werden ebenfalls als Funktion von znicht-perturbativ bestimmt. Der Vergleich mit Resultaten der effektiven Theorie ermöglicht einen nicht-perturbativen Test der HQET.

z	Y_R	R_R
5.15	-1.434(7)	-0.910(6)
6.0	-1.457(7)	-0.921(6)
6.6	-1.470(7)	-0.927(6)
9.0	-1.512(7)	-0.946(6)

Tabelle 6.3: Ergebnisse für Y_R und R_R im Kontinuumslimes.

Anhang A

Notationen

A.1 Explizite Darstellung von Matrizen

A.1.1 Pauli-Matrizen

Für die Pauli-Matrizen, die

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l, \qquad \sigma_i^2 = 1 \tag{A.1}$$

erfüllen, wird die Darstellung

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

verwandt.

A.1.2 Gell-Mann-Matrizen

Für die Erzeuger der Gruppe SU(3) wird folgende Darstellung gewählt:

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

A.1.3 Dirac-Matrizen

Die Dirac-Matrizen γ_{μ} werden nach [31] in einer chiralen Darstellung gewählt. Man erhält also

$$\gamma_{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & e_{\mu} \\ e_{\mu}^{\dagger} & 0 \end{pmatrix} \tag{A.4}$$

mit den 2 \times 2-Matrizen

$$e_0 = -1, \qquad e_k = -i\sigma_k. \tag{A.5}$$

Diese Wahl erfüllt die Algebra der Dirac-Matrizen

$$\gamma_{\mu}^{\dagger} = \gamma_{\mu}, \qquad \{\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}\} = 2\delta_{\mu\nu} \tag{A.6}$$

Explizit nehmen die Matrizen die Gestalt

$$\gamma_{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_{1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\gamma_{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_{3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (A.7)$$

an. Schließlich wird $\gamma_5\equiv\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$ definiert. Für γ_5 gilt

$$\gamma_5^{\dagger} = \gamma_5, \qquad \gamma_5^2 = \mathbb{1} \tag{A.8}$$

und

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (A.9)

Mit den Dirac-Matrizen lassen sich die hermiteschen Matrizen

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} \left[\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu} \right] \tag{A.10}$$

definieren, die durch

$$\sigma_{0k} = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0\\ 0 & -\sigma_k \end{pmatrix}, \quad \sigma_{ij} = -\epsilon_{ijk} \begin{pmatrix} \sigma_k & 0\\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix}, \quad (A.11)$$

gegeben sind.

Literaturverzeichnis

- M.Lüscher, R. Narayanan, P. Weisz, U. Wolff, The Schrödinger Functional: A Renormalizable Probe for Nonabelian Gauge Theories, Nucl. Phys. B 384 (1992) 168
- [2] R.Sommer, Non-perturbative renormalization of QCD, hep-ph / 9711243
- [3] M.Lüscher, P.Weisz, U.Wolff, A Numerical Method to Compute the Running Coupling in Asymptotically Free Theories, Nucl.Phys.B 359 (1991) 221
- [4] K.Symanzik, Schrödinger Representation and Casimir Effect in Renormalizable Quantum Field Theory, Nucl. Phys. B 190 [FS3] (1981) 1
- [5] M.Lüscher, Schrödinger Representation in Quantum Field Theory, Nucl.Phys.B 254 (1985) 52
- [6] R.Sommer, Non-perturbative Renormalization of HQET and QCD, plenary talk at Lattice 2002, hep-lat / 0209162
- [7] M.Lüscher, R.Sommer, P.Weisz, U.Wolff, A Precise Determination of the Running Coupling in the SU(3) Yang-Mills Theory, Nucl.Phys.B 389 (1993) 247
- [8] S.Sint, On the Schrödinger Functional in QCD, Nucl.Phys.B 421 (1994) 135
- [9] S.Sint, One Loop Renormalization of the QCD Schrödinger Functional, Nucl.Phys.B 451 (1995) 416

LITERATURVERZEICHNIS

- [10] S.Sint, R.Sommer, The Running Coupling from the QCD Schrödinger Functional – A One-loop Analysis, Nucl.Phys.B 465 (1996) 71
- [11] I.Montvay, G.Münster, Quantum Fields on a Lattice, Cambridge University Press, 1994
- [12] K.G.Wilson, Confinement of Quarks, Phys.Rev.D 10 (1974) 2445
- [13] R. Gupta, Introduction to Lattice QCD, hep-lat / 9807028
- [14] J.Kogut, L.Susskind, Hamiltonian Formulation of Wilson's Lattice Gauge Theories, Phys.Rev.D 11 (1975) 395
- [15] M.Lüscher, Exact Chiral Symmetry on the Lattice and the Ginsparg-Wilson Relation, Phys.Lett.B 428 (1998) 342
- [16] B.Sheikholeslami, R.Wohlert, Improved Continuum Limit Lattice Action for QCD with Wilson Fermions, Nucl.Phys.B 259 (1985) 572
- [17] M.Lüscher, S. Sint, R. Sommer, P. Weisz, U. Wolff, Non-perturbative O(a) Improvement of Lattice QCD, Nucl. Phys. B 491 (1997) 323
- [18] S.Aoki et al. (CP-PACS Collaboration), Non-perturbative Determination of c_{SW} in Three-Flavor Dynamical QCD, hep-lat / 0211034
- [19] M.Della Morte, R.Frezotti, J.Heitger, F.Knechtli, J.Rolf, R.Sommer, U. Wolff (ALPHA collaboration), *Recent Results on the Running Coupling in* QCD with Two Massless Flavors, hep-lat / 0209023
- [20] S.Aoki et al. (JLQCD Collaboration), Light Hadron Spectroscopy with Two Flavors of O(a)-Improved Dynamical Quarks, hep-lat / 0212039
- [21] M.Neubert, Heavy Quark Symmetry, Phys.Rept.245 (1994) 259
- [22] S.Capitani, M.Lüscher, R.Sommer, H.Wittig, Non-perturbative Quark Mass Renormalization in Quenched Lattice QCD, Nucl. Phys. B 544 (1999)

669

- M.Guagnelli, R.Sommer, H.Wittig, Precision Computation of a Lowenergy Reference Scale in Quenched Lattice QCD, Nucl.Phys.B 535 (1998) 389
- [24] S.Necco, R.Sommer, The $N_f = 0$ Heavy Quark Potential from Short to Intermediate Distances, Nucl.Phys.B 622 (2002) 328
- [25] J.Heitger, R.Sommer, A Strategy to Compute the b-Quark Mass with Non-perturbative Accuracy, Nucl.Phys.Proc.Suppl. 106 (2002) 358
- [26] M.Kurth, R.Sommer, Renormalization and O(a) Improvement of the Static Axial Current, Nucl. Phys. B 597 (2001) 488
- [27] M.Guagnelli, R.Petronzio, J.Rolf, S.Sint, R.Sommer, U.Wolff, Nonperturbative Results for the Coefficients b_m and $b_A - b_P$ in O(A) Improved Lattice QCD, Nucl.Phys.B 595 (2001) 44
- [28] J.Goldstone, Field Theories with 'Superconductor' Solutions, Nuovo Cim. 19 (1961) 154
- [29] J.Goldstone, A.Salam, S.Weinberg, Broken Symmetries, Phys.Rev. 127 (1962) 965
- [30] Particle Data Group, Review of Particle Physics, Phys.Rev.D 66 (2002) 1
- [31] M.Lüscher, S.Sint, R. Sommer, P. Weisz, Chiral Symmetry and O(a) Improvement in Lattice QCD, Nucl. Phys. B 478 (1996) 365
- [32] M.Lüscher, S.Sint, R. Sommer, H. Wittig, Non-perturbative Determination of the Axial Current Normalization Constant in O(a) Improved Lattice QCD, Nucl.Phys.B 491 (1997) 344
- [33] M.Lüscher, Advanced Lattice QCD, hep-lat / 9802029

- [34] R.Sommer, Fermionic Correlation Functions in the SF, unveröffentlicht, 1995
- [35] C.Itzykson, J.-B.Zuber, Quantum Field Theory, McGraw-Hill, 1980
- [36] A.Bode, P.Weisz, U.Wolff, Two Loop Computation of the Schrödinger Functional in Lattice QCD, Nucl.Phys.B 576 (2000) 517
- [37] G.de Divitiis, R.Petronzio, Nonperturbative Renormalization Constants on the Lattice from Flavor Non-singlet Ward Identities, Phys.Lett.B 419 (1998) 311
- [38] A.D.Sokal, Monte Carlo Methods In Statistical Mechanics: Foundations And New Algorithms, 1989
- [39] M.Kurth, R.Sommer, Heavy Quark Effectice Theory at One Loop Order: An Explicit Example, Nucl. Phys. B 623 (2002) 271
- [40] M.Guagnelli, R.Sommer, Non-perturbative O(a) improvement of the vector current, hep-lat / 9709088 und M.Guagnelli, private Mitteilung
- [41] W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T. Vetterling, Numerical Recipes in Fortran 77 (2nd Edition), Cambridge University Press, 2001
- [42] A.Ferling, persönliche Mitteilung
- [43] S.Sint, P.Weisz, Further Results on O(a) Improved Lattice QCD to One Loop Order of Perturbation Theory, Nucl.Phys.B 502 (1997) 251
- [44] R.Sommer, H.Wittig, Fundamental Parameters of QCD, physics / 0204015
- [45] L.Ryder, Quantum Field Theory, Cambridge University Press, 1985
- [46] K.Huang, Quarks, Leptons and Gauge Fields, World Scientific, 1982

- [47] O.Nachtmann, Elementarteilchenphysik, Vieweg, 1986
- [48] J.Smit, Introduction to Quantum Fields on a Lattice, Cambridge University Press, 2002
- [49] M.E.Peskin, D.V.Schroeder, An Introduction to Quantum Field Theory, Perseus Books, 1995
- [50] J.Heitger, persönliche Mitteilung
- [51] J.Heitger, M.Kurth, R.Sommer, Non-perturbative Renormalization of the Static Axial Current in Quenched QCD, in Vorbereitung und J.Heitger, M.Kurth, R.Sommer, Non-perturbative Determination of Z_A^{stat} in Quenched QCD, hep-lat / 0209078

Danksagung

Hier möchte ich mich bei denen bedanken, die direkt oder indirekt zum Gelingen dieser Diplomarbeit beigetragen haben. Ich danke

- Prof. Gernot Münster und Dr. Jochen Heitger für die interessante Aufgabenstellung,
- Jochen Heitger für die vielen Nachmittage, an denen er mir erklärt hat, was ich eigentlich tue,
- dem DESY Zeuthen für die Rechenzeit auf den dortigen APEmille-Rechnern,
- meinen Eltern Bernd Wennekers und Elisabeth Wennekers-Stute für ihre Unterstützung in allen Lebenslagen,
- Alexander Ferling, Cem Pulathaneli und Björn Vogt für die lockere Atmosphäre an Bord des Raumschiffs R.419,
- Imke Seifert, nochmals Björn Vogt und Jochen Heitger für das Korrekturlesen dieser Arbeit.

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

Münster, im Februar 2003