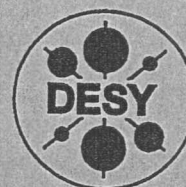


DEUTSCHES ELEKTRONEN-SYNCHROTRON

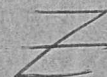


DESY-THESIS-1998-018

Juni 1998



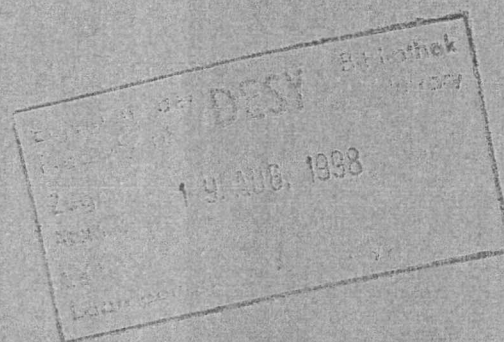
X1998-01274



Pfadintegral-Monte-Carlo-Berechnung des Spektrums
eines effektiven $SU(3)$ -Hamiltonoperators
in kleinen und mittelgroßen Volumina

von

H. Tiedemann



ISSN 1435-8085

NOTKESTRASSE 85 - 22607 HAMBURG

DESY behält sich alle Rechte für den Fall der Schutzrechtserteilung und für die wirtschaftliche Verwertung der in diesem Bericht enthaltenen Informationen vor.

DESY reserves all rights for commercial use of information included in this report, especially in case of filing application for or grant of patents.

To be sure that your reports and preprints are promptly included in the HEP literature database send them to (if possible by air mail):


DESY
Zentralbibliothek
Notkestraße 85
22603 Hamburg
Germany

DESY
Bibliothek
Platanenallee 6
15738 Zeuthen
Germany

**Pfadintegral-Monte-Carlo-Berechnung
des Spektrums eines
effektiven $SU(3)$ -Hamiltonoperators
in kleinen und mittelgroßen Volumina**

**Path integral Monte Carlo computation
of the spectrum of an
effective $SU(3)$ Hamilton operator
in small and medium volumes**

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von 
Hendrik Tiedemann
aus Anrath

Hamburg
1998

Abstract

Using a simple Monte-Carlo integration method for quantum mechanical problems on a 'time lattice' the massgaps of the low lying states of Lüscher's effective hamiltonian for small and intermediate volumes were computed. For small volumes there is good agreement between this method and previous Rayleigh-Ritz type calculations in the case of $SU(2)$, while notable differences are found in the case of $SU(3)$ for most states. The statistical and systematic errors are competitive with those of the variational method. Having no dependence on basis set size the Monte Carlo method ought to be a good alternative to the Rayleigh-Ritz calculations also for $SU(3)$ in intermediate volumes. An extension of the Monte-Carlo-method for this case was implemented. Initial results and remaining difficulties are discussed.

Zusammenfassung

Mit Hilfe einer einfachen Monte-Carlo Integrationsmethode für quantenmechanische Probleme auf einem 'Zeitgitter' werden die Massen der niedrig liegenden *Glueball*-Zustände des von Lüscher eingeführten effektiven Hamilton-Operators für kleine und mittlere Volumina berechnet. Man findet eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse der obengenannten Methode mit vorher durchgeführten Rayleigh-Ritz-Variationsrechnungen in Fall der $SU(2)$ -Eichgruppe, während sich spürbare Abweichungen für die meisten Zustände im $SU(3)$ -Fall ergeben. Die statistischen und systematischen Fehler sind vergleichbar mit den Fehlergrößen, die in der Variationsmethode durch einen zu kleinen Basissatz an Variationsfunktionen hervorgerufen werden. Da die Monte-Carlo-Methode keine Basisgrößenabhängigkeit hat, sollte sie auch für Berechnungen im mittelgroßen Volumen geeignet sein. Eine erste Implementierung der Methode für $SU(3)$ für diesen Fall wird vorgestellt und erste Ergebnisse und auftretende Probleme diskutiert.

Gutachter der Dissertation:

Prof. Dr. J. Bartels
Prof. Dr. G. Mack

Gutachter der Disputation:

Prof. Dr. J. Bartels
Prof. Dr. K. Fredenhagen

Datum der Disputation:

22. 06. 1998

Dekan des Fachbereichs Physik und

Vorsitzender des Promotionsausschusses: Prof. Dr. B. Kramer

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Eichtheorie in einem endlichen Volumen	13
2.1	Toroidales Volumen	13
2.1.1	Periodische Randbedingungen	13
2.1.2	Antiperiodische Randbedingungen	22
2.1.3	C-periodische Randbedingungen	25
2.2	Sphärisches Volumen	29
2.2.1	Einbeziehung von Instantonen	29
2.2.2	<i>Cavity</i> QCD	32
2.3	Andere Systeme	32
2.3.1	QCD in 1+1 Dimensionen	32
2.3.2	Thermodynamik von Eichfeldtheorien	33
3	Die Monte Carlo Methode	34
3.1	Variationsmethoden	34
3.2	Das Variations-Monte-Carlo-Verfahren	36
3.3	Greenfunktions- und Diffusions-Monte-Carlo	37
3.4	Monte-Carlo-Methoden in der Statistischen Mechanik	40
3.5	Pfad-Integral-Monte-Carlo	42
3.5.1	Allgemeine Prinzipien	42
3.5.2	Systematische Fehler	56
3.5.3	Beispielhafte Anwendungen	61

4	SU(2) und SU(3) im kleinen Volumen	68
4.1	Der effektive Hamilton-Operator	68
4.1.1	SU(2)	68
4.1.2	SU(3)	69
4.2	Methodische Details	70
4.3	Resultate und Diskussion	71
4.3.1	SU(2)	71
4.3.2	SU(3)	75
5	Reine SU(2)- und SU(3)- Eichtheorie im mittleren Volumenbereich	82
5.1	SU(2)- Eichtheorie	82
5.1.1	Die Pfadintegral- Monte- Carlo-Integration des effektiven Lagrangian	82
5.1.2	Abänderungen und Korrekturen der obigen Methode	88
5.2	SU(3)- Eichtheorie	93
5.2.1	Das Vakuumtal	93
5.2.2	Vorschlag einer neuen Konfiguration	97
5.2.3	Berechnung der kinetischen Energie und der Wirkung	97
5.2.4	Randbedingungen für die angeregten Zustände und Operatoren	98
5.2.5	Resultate und offene Probleme	99
	Schlußbemerkungen	101
	Appendix	104
	Danksagungen	105
	Bibliographie	106

Kapitel 1

Einleitung

Bevor im zweiten Teil dieser Einleitung die konkreten Ergebnisse und Methoden der vorliegenden Arbeit vorgestellt werden, soll zuerst versucht werden, die hier verwendete, spezielle Methode in den Zusammenhang der Probleme nichtabelscher Eichtheorien und der zu ihrer Lösung verwendeten Methoden einzubetten (– ohne dabei Vollständigkeit anzustreben):

Seit Feynmans grundlegenden Arbeiten [1, 2] existiert die sog. Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik als Alternative zum kanonischen Operatorformalismus der Quantenmechanik. Während man mit dieser Methode nur wenige Probleme analytisch lösen kann [3], ist die Formulierung doch einerseits sehr suggestiv, andererseits sehr flexibel und leicht auf Systeme mit mehreren Freiheitsgraden zu verallgemeinern. Suggestiv ist die Methode in dem Sinn, daß sie es dem Anwender erlaubt, sich die Wege, die ein Teilchen im Ortsraum nimmt, vorzustellen. Zwar muß man über alle möglichen kontinuierlichen, d. h. auch nicht differenzierbaren Wege summieren, um die Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude zu erhalten und dabei den Beitrag jedes Weges mit dem komplexen Faktor $e^{iS(x)/\hbar}$ gewichten. Aber dieses Verfahren zeigt auch sofort die Korrespondenz zum klassischen System auf, wenn nahe beieinanderliegende Pfade durch stark oszillierende Faktoren sich in der Summe gegenseitig aufheben und nur den Weg übriglassen, der die Wirkung stationär gegenüber kleinen Variationen des Weges macht. Dies zeichnet aber gerade den klassischen Weg aus.

Zwei (bzw. drei) weitere Entwicklungen führten zu einer wachsenden Popularität der Pfadintegral-Methode: Symanzik [4] zeigte, daß man die Pfadintegralversion der Quantenfeldtheorie in imaginärer Zeit formulieren und alle experimentell interessierenden Größen am Ende durch analytische Fortsetzung erhalten kann. Überdies wird in dieser Formulierung ein quantenmechanisches System einem thermodynamischen äquivalent, wenn man die (imaginäre) Zeit periodischen Randbedingungen unterwirft. Für ein Ein-Teilchen-Quantensystem ist das entsprechende thermodynamische durch eine Hamiltonfunktion gekennzeichnet, in der die diskretisierte kinetische Energie nun als potentielle Energie von harmonisch gekoppelten "Teilchen" erscheint, die jeweils auf einer Zeitscheibe sitzen und nicht nur dem jeweiligen Potential auf der Zeitscheibe unterliegen, sondern auch einem harmonischen Potential, das "Teilchen" zweier Zeitscheiben miteinander koppelt. In der physikalischen Chemie wird gerne von den sog. Ringpolymeren gesprochen, wenn diese Art der Einführung quantenmechanischer Effekte gemeint ist. Die quantenmechanische Übergangsamplitude wird nun in ihrer Struktur äquivalent einer Zustandssumme, quantenmechanische Zweipunktfunktionen äquivalent thermodynamischen Korrelationsfunktionen, aus deren Abfallverhalten in imaginärer Zeit sich die Energiedifferenz zwischen dem ersten

angeregten und dem Grundzustand des quantenmechanischen Systems direkt ablesen läßt, ohne analytisch fortsetzen zu müssen.

Die zweite Entwicklung liegt in der Tatsache begründet, daß schon 1953 Metropolis, Rosenbluth & Rosenbluth und Teller & Teller [5] ein Rechenverfahren vorstellten, das es gestattete, die Zustandssumme von Systemen mit vielen Teilchen numerisch zu bestimmen. Das stetige Wachstum der Rechenleistung der Computer hat dazu geführt, daß ab Anfang der Achtziger Jahre auch die Berechnung (3+1) dimensionaler diskretisierter Quantenfeldtheorien möglich wurde. Die sog. Monte-Carlo-Methoden sind zwar mit systematischen Fehlern behaftet, die aus der statistischen Auswertung der hochdimensionalen Pfadintegrale herrühren, (neben den durch die Diskretisierung hervorgerufenen), aber diese gehen mit $\frac{1}{\sqrt{N}}$, wobei N die Zahl der unabhängigen Konfigurationen ist. Inzwischen ist das Monte-Carlo-Verfahren so verbreitet und die Rechenleistung so groß, daß man daran denken kann, es auch in der Quantenmechanik einzusetzen, wo seit Beginn die traditionellen Methoden wie z. B. die Variationsmethode dazu dienen, Ergebnisse hoher Genauigkeit zu erzielen. (Während diese Methoden in der Quantenfeldtheorie nur wenig angewandt werden [6] [7].) Natürlich kann man quantenmechanische Systeme mit nur wenigen Freiheitsgeraden auch heute mit einer Genauigkeit lösen, die jene von Monte-Carlo-Methoden weit übertrifft. Aber es gibt heutzutage einen Bereich, in dem die Zahl der Freiheitsgerade, obwohl nicht so groß wie in der Gitterfeldtheorie, doch so groß ist, daß die MC-Methode langsam konkurrenzfähig zu werden verspricht. Dies gilt insbesondere dann, wenn der Hamiltonoperator kompliziert, und eine Basis für die Variationsrechnung schwierig zu finden ist. In der vorliegenden Arbeit wird nun versucht, genau so ein Problem mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode zu lösen. Obwohl die Zahl der Freiheitsgerade relativ klein ist - nämlich 9 bzw. 24 -, ist der Hamiltonoperator und die Topologie des Konfigurationsraumes doch so kompliziert, daß die Variationsverfahren nur unter großem Programmieraufwand [8, 9] eine gute Genauigkeit erzielen können - wenn überhaupt [10]. Dazu kommt, daß man es hier mit einem Problem vom Typ 'anharmonischer Oszillator' bzw. *double well* zu tun hat, nur in mehreren Dimensionen und mit mehreren Potentialtöpfen. Genauso wie man beim anharmonischen Oszillator das Problem dadurch lösen kann, daß man die Symmetrie des Problems ausnützt, die dazu führt, daß die Eigenfunktionen entweder gerade oder ungerade Symmetrie bezüglich des Ursprungs haben müssen, indem man die (Variations-)Wellenfunktion auf eine Seite des *double well*-Potentials beschränkt und an die Wellenfunktion am Ursprung die Forderung nach verschwindender Wellenfunktion für Zustände mit ungerader Symmetrie bzw. verschwindender Tangente für den Fall gerader Symmetrie stellt, kann auch dieses höherdimensionale Problem für die effektive SU(2)- bzw. SU(3)-Theorie durch Einschränkung der Wellenfunktionen auf einen Potentialtopf und Wahl der Randbedingungen im Übergangsbereich zu den anderen Potentialtöpfen mit Variationsmethoden gelöst werden. Die Symmetrie zwischen den verschiedenen 'Vakua' wird durch die Einbeziehung masseloser Fermionen gebrochen. Es entsteht wieder ein globales Minimum des Potentials. Damit ist die oben skizzierte Lösungsmethode nicht mehr ganz so einfach durchführbar. Als Alternative bieten sich Monte-Carlo-Methoden auf dem Zeitgitter an.

Da das quantenmechanische Problem aus dem Versuch einer näherungsweise Lösung der Theorie der sog. nichtabelschen Eichtheorie hervorging, wird im folgenden eine kurze Einführung gegeben: [11, 12] Seit ca. 20 Jahren werden die mit den drei fundamentalen Wechselwirkungen Elektromagnetismus, schwache Kernkraft und starke Kernkraft (bzw. verallgemeinernd Quantenchromodynamik) verbundenen Phänomene der Kern- und Hochenergiephysik erfolgreich durch Quantenfeldtheorien mit lokaler Eichsymmetrie und das Quarkmodell beschrieben. Im Fall der schwachen und starken Kernkraft sind die entsprechenden Symmetriegruppen (SU(2) bzw. SU(3)) nichtabelsch, woraus folgt, daß die Wechselwirkungsquanten selbst eine entsprechen-

de 'Ladung' tragen und auch miteinander wechselwirken können — im Gegensatz zur elektromagnetischen Kraft, deren Wechselwirkungsquanten — die Photonen — ungeladen sind. Die Quarks tragen eine sog. Farbladung, an welche dann die Wechselwirkungsquanten der SU(3)-Eichsymmetrie (die sog. Gluonen) koppeln können. Obwohl die Existenz der Quarks unter anderem durch Elektron-Proton-Streuungsexperimente plausibel gemacht werden konnte, wurden Quarks bislang noch nicht frei nachgewiesen.

Die Lagrangedichte der QCD ist gegeben durch

$$\mathcal{L}_{QCD} = \sum_{a,f} \bar{q}_f^a [i\gamma^\mu \mathbf{D}_\mu - m_f] - \frac{1}{2} \text{Tr}[\mathbf{F}_{\mu\nu} \mathbf{F}^{\mu\nu}]. \quad (1-1)$$

In der obigen Formel wurden die Spinorindizes der Quarkfelder unterdrückt. Der Index a läuft von 1 bis 3 und bezeichnet den Farbfreiheitsgrad, während f von 1 bis 6 läuft und den *flavour*-Freiheitsgrad bezeichnet, d. h. ob die Quarksorte *up*, *down*, *strange*, *charm*, *bottom* oder *top* vorliegt. Der *flavour*-Freiheitsgrad ist für die starke und die elektromagnetische Wechselwirkung eine Erhaltungsgröße, für die schwache Wechselwirkung aber nicht. Der Farbfreiheitsgrad verkörpert in Analogie zur QED die "starke" Ladung und ist damit für die Dynamik verantwortlich. Aus der Forderung der Invarianz der Quarkfelder nicht nur unter globalen SU(3)-Farbtransformationen, sondern auch lokalen Eichtransformationen folgt die Existenz von Eichfeldern A_μ^a und deren kovariante Kopplung an die Quarkfelder

$$\mathbf{D}_\mu = \partial_\mu + ig\mathbf{A}_\mu. \quad (1-2)$$

Aus den Eichfeldern leitet man wie in der QED die Feldstärken $F_{\mu\nu}^a$ ab. Die lokale Eichinvarianz des kinetischen Terms der Eichfelder in der Lagrangedichte erfordert die Addition des Kommutators. Damit wird aber gleichzeitig eine Selbstwechselwirkung der Gluonen induziert.

$$\mathbf{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu + ig[\mathbf{A}_\mu, \mathbf{A}_\nu] \quad (1-3)$$

Die Gluonfelder und die daraus abgeleiteten Feldstärken liegen in der zugehörigen Lie-Algebra der SU(3)

$$\mathbf{A}_\mu = A_\mu^a \frac{\lambda^a}{2}, \quad \mathbf{F}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}^a \frac{\lambda^a}{2}, \quad (1-4)$$

deren acht Generatoren t^a die Vertauschungsrelationen

$$[t^a, t^b] = if^{abc}t^c, \quad t^a = \frac{\lambda^a}{2} \quad b,c \text{ entsprechend mit } a,b,c=1,\dots,8 \quad (1-5)$$

und die Normierungsbedingungen

$$\text{Tr}(t^a t^b) = \delta^{ab}/2 \quad (1-6)$$

erfüllen. (Dabei bezeichnen λ^a die sog. Gell-Man-Matrizen.) Man nimmt heute an, daß die Quantenchromodynamik(QCD) bewirkt, daß sich zwischen zwei Quarks, die man voneinander trennen möchte, ein linear mit dem Abstand wachsendes Potential aufbaut, das dazu führt, daß bei genügend großem Abstand, der aber im Vergleich zu makroskopischen Distanzen natürlich klein ist, zwischen den Quarks soviel Energie in dem System gespeichert ist, daß der Prozeß der Paarerzeugung abläuft. Dabei wird zwischen den Quarks ein Quark-Antiquarkpaar gebildet. Jedes dieser Quarks vereinigt sich mit dem zu trennenden ursprünglichen Quark zu einem 'farbladungsneutralen', zusammengesetzten Hadron. Da zwischen diesen Hadronen nur noch die sehr kurzreichweitige starke Kernkraft wirkt, deren Reichweite hier aber schon überschritten wurde, erhalten wir statt zwei getrennter Quarks nur wieder zwei oder mehr Hadronen.

Dieses Phänomen bezeichnet man als *confinement*. Es wirkt ebenso zwischen den Gluonen, da diese ja ebenfalls Farbladung tragen. Theoretisch sollten also auch farbneutrale, zusammengesetzte Zustände aus Gluonen existieren. Diese bezeichnet man als 'Glueballs'. Sie können nach ihren Eigendrehimpulsen und Verhalten unter Raumspiegelungen (Parität) klassifiziert werden. In der Praxis ist ein eindeutiger Nachweis ihrer Existenz allerdings schwierig, da sie vermutlich in dem Massenbereich liegen, in dem man schon viele verschiedene Quark-Antiquark-Zustände (sog. Mesonen) gefunden hat, die teilweise die gleichen Quantenzahlen wie die Glueballs haben. Man glaubt heutzutage, daß der Grund für das *confinement* in der gluonischen Selbstwechselwirkung, die aus der nichtabelschen Struktur der Theorie folgt, liegt. Nach diesen Vorstellungen führt die reine Gluondynamik zur Bildung sog. Flußschläuche aus farbelektrischen Fluß. Da sich in diesen die Feldlinien nicht ausbreiten können wie im Fall der elektromagnetischen Wechselwirkung, bleibt die Energiedichte unabhängig vom Abstand konstant und führt so zu einem linear mit dem Abstand wachsenden Potential. Allerdings gibt es auch Theorien, die den Quarks die entscheidende Rolle bei der Erklärung des Confinement einräumen [13].

Die Tatsache, daß die Wechselwirkungsquanten der QCD selbst Farbladung tragen, führt auch dazu, daß die effektive Ladung einer Quelle (z.B. Quark oder Gluon) umso kleiner erscheint, je weiter man sich ihr nähert — im Gegensatz zur elektromagnetischen Wechselwirkung. Man bezeichnet dieses Phänomen als *asymptotische Freiheit*. Umgekehrt führt dies dazu, daß die effektive Kopplungskonstante bei großen Abständen groß wird. Damit bricht aber die Grundlage für ein Näherungsverfahren zusammen, das bei der Berechnung elektromagnetischer Prozesse sehr erfolgreich war, nämlich die sog. Störungstheorie. In ihr werden die zu berechnenden Größen in eine Potenzreihe in Potenzen der Kopplungskonstante entwickelt. Da aber im Fall der QCD die effektive Kopplung für große Abstände groß wird, konvergiert die Reihe nun nicht mehr. Hingegen läßt sich die QCD bei kleinen Abständen bzw. hohen Energien genauso störungstheoretisch auswerten wie die anderen Theorien und besteht die Tests durch Hochenergie-Streuexperimente gut. (Man kann störungstheoretisch das Verhalten der renormierten Kopplung berechnen. Die gluonische Selbstwechselwirkung führt zu einem negativen Vorzeichen des ersten Terms der sog. Betafunktion. Dies zeigt quantitativ das Verhalten der asymptotischen Freiheit.) Bei Fragen jedoch, die gebundene Zustände, also z.B. deren Spektren (d.h. in diesem Fall die Massen der Hadronen bzw. *Glueballs*) betreffen, versagt die Störungstheorie aus dem obengenannten Grund [11]. Als Konsequenz daraus ergibt sich die Notwendigkeit der Suche nach anderen, nichtstörungstheoretischen Methoden.

Eine der am meisten verwendeten ist die sog. Gittereichtheorie: Das Raumzeitkontinuum wird durch ein endliches 4-dim. Gitter genähert. Wenn man periodische Randbedingungen wählt, erhält man die Topologie eines (Hyper-)Torus. Die interessierenden Größen werden durch (Funktional)integration in euklidischer Raumzeit berechnet. Da durch die Gitterapproximation die unendlich vielen Freiheitsgrade einer Feldtheorie auf endlich viele reduziert werden, läßt sich die Integration mit Hilfe stochastischer Methoden auf dem Computer durchführen (z.B. mit der sog. Monte-Carlo-Methode). Diese Rechnungen benötigen viele Hundert Stunden an Rechenzeit der größten Supercomputer [14]. Für reine Eichtheorien, d.h. Theorien nur mit den wechselwirkenden Gluonen, scheint man heute annähernd den sog. Kontinuumslimit erreicht zu haben, d.h. die Ergebnisse ändern sich nicht mehr wesentlich, wenn man die Zahl der Gitterpunkte vergrößert oder den Gitterabstand verkleinert [15]. Theorien mit der vollständigen Berücksichtigung der Quarks sind aber noch weiter von diesem Ziel entfernt [26] [17]. Außerdem werden in diesen Rechnungen unrealistisch große Werte für die Fermionenmassen, d. h. die Massen der *up*-, *down*- und *strange*-Quarks, verwendet und danach die Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen zu realistischen Fermionenmassen hinunter extrapoliert. Ein Vergleich dieser Extrapolationen im mittleren Volumen mit den entsprechenden Rechnungen für den effektiven Hamiltonoperator

mit masselosen Fermionen könnte vielleicht ein nützlicher *benchmark*-Test sein.

Dagegen hat schon vor der Entwicklung der Monte-Carlo-Methoden für die Gittereichtheorie Bjorken einen anderen Ansatz vorgeschlagen: Da die effektive Kopplungskonstante der QCD bei kleinen Abständen so klein wird, daß die Störungstheorie praktikabel ist, schlug er vor, die Theorie zuerst störungstheoretisch in einem winzig kleinen räumlichen Volumen (von ihm Femto-Universum genannt) zu untersuchen. Nachdem man die Theorie dort verstanden hätte, würde man dann versuchen, das Volumen sukzessive zu vergrößern oder mehrere kleine Volumina aneinanderzufügen [18, 19].

Eine erste konkrete Realisierung dieser Idee war die Arbeit von Lüscher, in der er für einen kleinen 3-Torus nach einer Fourierzerlegung der Eichfelder und Ausintegration der räumlich nicht-konstanten Feldkomponenten mit Hilfe der Störungstheorie einen effektiven Hamiltonoperator für die räumlich konstanten Moden einer beliebigen reinen $SU(N)$ -Eichtheorie herleitete [20]. Die Torustopologie des Raumes führt aber in diesem Fall dazu, daß das klassische Vakuum (d.h. der Zustand kleinster Energie) nicht (bis auf Eichtransformationen) eindeutig bestimmt ist - nämlich alle Feldkomponenten gleich Null -, sondern eine $3(N-1)$ -dimensionale Untermannigfaltigkeit des $3(N^2-1)$ dim. Raumes der räumlich konstanten Feldkomponenten ist. Diese nennt man das Toronental. Diese Entartung des klassischen Vakuums wird durch Quantenfluktuationen teilweise wieder aufgehoben. Es zeigt sich aber, daß N^3 Punkte im Konfigurationsraum verbleiben, die jeweils ein lokales Minimum der Energie darstellen und voneinander durch 'Potentialberge' getrennt werden, die durch die Quantenfluktuationen der Moden, die nicht dem Toronental angehören, induziert werden. Im Endeffekt hat man also N^3 äquivalente 'Potentialtöpfe', deren Energieeigenwerte in erster Näherung gleich sind, wenn die Schwellen zwischen den Potentialtöpfen so hoch sind, daß man sie als praktisch voneinander isoliert ansehen kann. Dies ist für einen Torus mit kleinem Volumen der Fall.

Für $SU(2)$ wurden die Energieeigenwerte und Eigenfunktionen für die verschiedenen Zustände mit unterschiedlichen Eigendrehimpulsen und Paritäten von Lüscher und Münster mit Hilfe der Raleigh-Ritz-Variationsmethode bestimmt [21]. Später gelang dies Weisz und Ziemann auch für $SU(3)$, wenn auch die Zustände höherer Energie nicht mit der gleichen Genauigkeit wie in $SU(2)$ (oder gar nicht) zu bestimmen waren [10]. Für Volumina mittlerer Größe werden die Potentialschwelle so klein, daß die Näherung isolierter Potentialtöpfe nicht mehr gerechtfertigt ist. Durch quantenmechanisches Tunneln von einem Topf zum anderen wird die Entartung der Spektren in den einzelnen Töpfen aufgehoben. Dieses Problem wurde von Van Baal und Koller für $SU(2)$ zuerst mit Hilfe semiklassischer Methoden [22, 23] und später mit einer verbesserten Raleigh-Ritz-Methode gelöst [24].

Ein Vergleich mit Monte-Carlo-Ergebnissen zeigt eine gute Übereinstimmung der energetisch tiefer liegenden Zustände, die fast perfekt wird, wenn man die analytische Rechnung ebenfalls mit der Gitterregularisierung durchführt und dann die Ergebnisse mit gleicher Anzahl von Gitterpunkten vergleicht [25]. Für $SU(3)$ wurde das Spektrum und dessen Aufspaltung durch das Tunneln von Vohwinkel in seiner Doktorarbeit berechnet, und ein Vergleich mit Monte-Carlo-Ergebnissen ist ebenfalls befriedigend [8, 9].

Zusammenfassend kann man also sagen, daß im Bereich mittelgroßer Volumina und für reine Eichtheorien ohne Fermionen (d.h. in diesem Fall Quarks) die analytischen und die Monte-Carlo-Rechnungen gut übereinstimmen. Dies ist ein wichtiger Test für die Monte-Carlo-Simulationen und zeigt, daß man die Theorie zumindest bis in diesen Volumenbereich verstanden hat. Leider ist der Bereich großer Volumina, in dem sich die Torustopologie des Raumes nicht mehr bemerkbar machen sollte, analytisch noch nicht erreicht, und auch ein Mechanismus, der das Confinement (in diesem Fall der Gluonen in Gluebällen) verständlich machen würde, noch nicht eindeutig

demonstriert worden, obwohl sich die Hinweise mehren, daß das Szenario der Monopolkondensation in einem sog. dualen Supraleiter die Dinge zutreffend beschreibt. Den Vakuumzustand der QCD stellt man sich darin als ein Kondensat farbmagnetischer Monopole vor [26], (obwohl in letzter Zeit durch die Messung von halbzahligen topologischen Ladungen Theorien Bestätigung finden, die semiklassische Feldkonfigurationen, die sowohl farbelektrische und farbmagnetische Ladung tragen, sog. Dyonen, für das *confinement* verantwortlich machen [27] [28].) Das *confinement* käme in diesem Fall dadurch zustande, daß die Linien elektrischen Farbflusses, die von den Quarks ausgehen, im dualen Supraleiter nur als Flußschläuche zwischen den Quarks existieren können, da der duale Supraleiter genauso danach strebt, farbelektrische Flußlinien zu verdrängen, wie ein realer Supraleiter das Eindringen von magnetischen Feldlinien zu verhindern sucht (Dualer Meisner-Effekt). Den Abrikosov-Flußschläuche im Supraleiter 2. Art entsprechen die Schläuche farbelektrischen Flusses zwischen den Quarks, die sich wie die *strings* im alten Stringmodell der QCD verhalten [29].

Für eine Theorie, die nicht nur die Gluonen, sondern auch die Fermionen berücksichtigt, läßt sich mit den gleichen analytischen Methoden wie im Fall der reinen Eichtheorie ein effektiver Hamiltonoperator für die räumlich konstanten Moden der Gluonen herleiten, indem man auch die Fermionfreiheitsgrade in Ein-Schleifen-Näherung ausintegriert. Durch den Beitrag der Fermionen zum Potential wird nun die Entartung zwischen den Potentialtöpfen aufgehoben, so daß es in diesem Fall wieder ein globales Minimum des effektiven Potentials gibt. Die anderen Potentialtöpfe werden zu lokalen Minima.

Die Einbeziehung der Fermionen wurde von van Baal[25] sowie von Kripfganz und Michael [31] vorgeschlagen, die auch eine andere Lösungsmethode für den effektiven Hamiltonoperator einführen, nämlich das Monte-Carlo-Verfahren angewendet auf quantenmechanische Probleme. Hier wird nur die Zeit diskretisiert, und man erhält ein (1-dim.) Zeitgitter. Obwohl man bei diesem Verfahren im Prinzip mit ähnlichen Problemen zu kämpfen hat wie bei Gittereichtheorie-Monte-Carlo-Rechnungen, nämlich Fehler durch endliche Gittergröße und Zeitschritt, läßt sich doch - da das Zeitgitter recht groß gemacht werden kann - der systematische und statistische Fehler auf wenige Prozent begrenzen, so daß die Methode konkurrenzfähig wird zu den Variationsrechnungen, die mit den Fehlern aufgrund eines endlichen Basissatzes für die zu variierende Wellenfunktion belastet sind.

Aufgrund der Tatsache, daß durch die Fermionen die Entartung zwischen den Potentialtöpfen aufgehoben wird, läßt sich die Raleigh-Ritz-Variationsmethode nur noch für den Potentialtopf verwenden, der das globale Minimum des Potentials bildet. Die Einbeziehung auch der lokalen Minima, die bei mittelgroßem Volumen wichtig werden, ist bislang nur mit der Monte-Carlo-Methode möglich. Für SU(2) wurde der Einfluß der lokalen Minima des Potentials ebenfalls von Kripfganz und Michael berechnet. Diese Rechnungen sind aber schon recht aufwendig, da die Parametrisierung des Konfigurationsraumes in der Umgebung der Minima und das Aneinanderpassen der Koordinaten im Übergangsbereich nichttrivial sind. Auch steigt der Rechenzeitbedarf, da nun alle Töpfe vom Monte-Carlo-Prozeß untersucht werden müssen [32, 33].

In der vorliegenden Arbeit wird versucht, die Methoden von Michael und Kripfganz auf den SU(3)-Fall zu übertragen. Dieses System ist nun komplizierter als die effektive SU(2)-Eichtheorie. Die Zahl der Freiheitsgrade wächst auf 24, da für jeden räumlichen Freiheitsgrad 8 Farbfreiheitsgrade berücksichtigt werden müssen. Aus der Tatsache, daß die Lie-Algebra der Gruppe SU(3) zwei diagonale Generatoren bzw. zwei Casimir-Invarianten besitzt, folgt, daß das Vakuumtal 6-dimensional ist, d. h. 2-dimensional für jede Raumrichtung. Zudem stellt sich heraus, daß die sog. Weylsymmetrie, die im SU(2)-Fall eine einfache Spiegelung am Ursprung entlang des

Vakuums als war, hier nun zu einem noch komplizierteren Konfigurationsraum führt, der in der räumlichen Verteilung der Potentialminima und der Grenzen ihrer Einzugsgebiete entfernt an eine Bienenwabenstruktur erinnert. Außerdem werden die Eigenzustände nicht nur durch ihr Transformationsverhalten unter den Symmetrien der Würfelgruppe und der Raumparität sondern auch unter der sog. C-Parität charakterisiert.

Zuerst wurde die Genauigkeit der Pfadintegral-MC-Methode im Bereich kleinen Volumens, d. h. wenn Tunneleffekte zu vernachlässigen sind, getestet: Die Länge der Thermalisierungsphase, die Zahl der unabhängigen Konfigurationen, die benötigt wird, um ein Ergebnis hinreichender Genauigkeit zu erzielen, und der Einfluß des endlichen Zeitschritts auf die Ergebnisse wurden ermittelt. Dabei dienten die gutkonvergierten Ergebnisse von Lüscher und Münster [21] als Kontrolle. Es zeigt sich, daß die *mass gaps*, d. h. die Differenzen zwischen dem ersten angeregten Zustand und dem Grundzustand, sich mit einer Genauigkeit von wenigen Prozent oder besser bestimmen lassen. Im Rahmen dieser Genauigkeit hat die Diskretisierung der Zeit keinen Einfluß auf die Ergebnisse. Daß der Einfluß des endlichen Zeitschritts gering (Größenordnung ein Prozent) ist, wurde durch Variation des Zeitschritts von 0.2 auf 0.1 bzw. 0.15 gezeigt. Zwar zeigen die Massenverhältnisse für SU(2) für größere Werte der Skalenvariablen $z_{E+} = m_{E+}L$, die die lineare Ausdehnung des Torusvolumens, gemessen in Compton-Wellenlängen des niedrigsten *mass gaps* bzw. *glue balls*, angibt, nahe dem Tunnelübergang Abweichungen von den Raleigh-Ritz-Ergebnissen. Da man aber in diesem Bereich eine abnehmende Genauigkeit der Variationsrechnung erwartet, müssen diese geringen Abweichungen vielleicht nicht der Monte-Carlo-Methode angekreidet werden.

Wenn man die von van Baal gefundenen Umskalierungsformel von Raleigh-Ritz-Ergebnissen der reinen Eichtheorie auf Ergebnisse mit 3 masselosen Fermionen (Quarks) durch direkten Vergleich mit den Monte-Carlo-Ergebnissen überprüft, zeigen sich ebenfalls nur Abweichungen im Prozentbereich. Da die Umskalierung Terme vierter Ordnung in der Entwicklung der Energien nach Potenzen von $g^{2/3}$ nicht berücksichtigt, ist eine vollständige Übereinstimmung wohl auch nicht zu erwarten.

Nachdem sich die Pfadintegral-MC-Methode für SU(2) im kleinen Volumen als recht genau und dabei einfach zu handhaben erwiesen hatte, wurde der SU(3)-Fall im kleinen Volumen berechnet. Hier waren die Ergebnisse von Weisz und Ziemann von teilweise fragwürdiger Genauigkeit, da für einige Zustände nur eine sehr kleine Basis für die Variationsrechnung gefunden wurde. Mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode konnte dieses Problem umgangen werden, da eine einzige Basisfunktion als Projektor auf den jeweils gesuchten Zustand dienen kann. Die numerische Rechnung erfordert einen etwas größeren Programmieraufwand als bei der SU(2)-Eichgruppe, da relativ viele Raum- und Farbindizes summiert werden müssen, um eichinvariante Polynome in den räumlich konstanten Feldmoden zu erhalten, die dann als Projektoren dienen können. Statt einer Verschachtelung vieler Programmschleifen empfiehlt es sich, einige der Summen unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften der SU(3)-Strukturkonstanten von Hand auszuführen und danach die Teilergebnisse in den einzelnen Summen immer wieder zu verwenden. Um das Programm zu vektorisieren, wurde der *red-black*-Algorithmus benutzt, d. h. es wurden zuerst die gradzahligen und danach die ungradzahligen Zeitscheiben in einem *sweep* durch das Zeitgitter besucht. Da die so berechneten Erwartungswerte von Korrelationsfunktionen in imaginärer Zeit effektive Massen liefern, die über mehrere Zeitschritte unabhängig vom Zeitabstand zwischen den Operatoren in den Korrelationsfunktionen sind, und sich die *mass gaps* auch bei Variationen des Zeitschritts wenig ändern, ist die Tatsache, daß die meisten Monte-Carlo-Ergebnisse unter denen der Variationsrechnungen liegen, wohl auf die ungenügende Basissatzgröße der Raleigh-Ritz-Rechnung zurückzuführen. Da die Abhängigkeit der *mass gaps* der verschiedenen irreduziblen

Darstellungen der Würfelgruppe von der Skalenvariablen $z_{E^{++}}$ und damit der linearen Ausdehnung des Torus gemessen in Compton-Wellenlängen des leichtesten 'glueballs' ziemlich flach verläuft, lassen sich die Monte-Carlo-'Meßpunkte' gut durch ein Polynom zweiter Ordnung in $z_{E^{++}}$ interpolieren und das resultierende Ergebnis mit der van Baal'schen Methode umskalieren, um die Ergebnisse für SU(3) im kleinen Volumenbereich mit drei masselosen Quarks zu erhalten.

Bevor man darangehen kann, auch im mittleren Volumenbereich für die SU(3)-Eichtheorie die *mass gaps* mit Hilfe der Zeitgitter-Monte-Carlo-Methode zu berechnen, muß eine andere Methode entwickelt werden, im Metropolis-Algorithmus neue Konfigurationen vorzuschlagen, die Tunnelübergängen zwischen zwei Einzugsbereichen von Quantenvakua entsprechen, da sich Michaels Vorgehensweise [33] nicht einfach auf den SU(3)-Fall übertragen läßt. Darum wurde die Methode der 'Reflektion am Rand' eingeführt und zuerst einmal am Beispiel der reinen SU(2)-Eichtheorie getestet. Im Rahmen der statistischen Fehler Es ergibt sich eine beinahe perfekte Übereinstimmung der mit der neuen Methode erzielten Ergebnisse mit Michaels Resultaten, wenn man den Rahmen, der durch den statistischen Fehler gegeben ist, berücksichtigt. Da sich Michaels Ergebnisse auch bei einem Zeitschritt von 0.1 von den van Baalschen Ergebnissen, die sozusagen den 'Kontinuumslices in der Zeit' darstellen, noch etwas unterschieden, wurde im Rahmen dieser Arbeit versucht, mit noch kleineren Zeitschritten dem 'Kontinuumslices' näher zu kommen. Da bei immer kleinerem Zeitschritt im Metropolis-Algorithmus das sog. *critical slowing down* die Effizienz der Rechnung immer mehr einschränkt, blieb eine kleine Differenz zwischen den Monte-Carlo- und den Ergebnissen der Variationsrechnungen bestehen. Der Einsatz einer verbesserten Wirkung, die Terme zweiter Ordnung im Zeitschritt berücksichtigt, bewirkte keine Annäherung an den Kontinuumslices.

Nach diesen Vorarbeiten wurde dann ein an den höherdimensionalen SU(3)-Fall angepasstes Monte-Carlo-Programm entwickelt und getestet. Die Ergebnisse zeigen zur Zeit noch größere statistische Fehler als im SU(2)-Fall, da der Algorithmus noch nicht optimiert ist und zu viel Rechenzeit zur Erzeugung einer neuen Konfiguration verbraucht. Die Gründe hierfür sind: Die Ermittlung der kinetischen Energie zwischen zwei Zeitscheiben wird aufgrund des nichttrivialen Grenzverlaufs zwischen den verschiedenen Potentialtöpfen sehr zeitaufwendig, da das Minimum des Weges zwischen zwei Vektoren im Farbraum, die zu unterschiedlichen Zeitscheiben gehören, in einem mehrdimensionalen Unterraum gesucht werden muß. Auch die Methode, neue Konfigurationen für den Metropolis-Algorithmus vorzuschlagen, wird sehr rechenzeitaufwendig, wenn die neue Konfiguration außerhalb des Einzugsgebiets eines der Potentialtöpfe liegen wird, d. h. Tunneln stattfindet. Der volle Konfigurationsraum wird in einzelne 'Karten' zerlegt, die um die einzelnen Quantenvakua zentriert sind. Die globalen Koordinaten werden umgewandelt in lokale Koordinaten plus einem diskreten Index. Wie im SU(2)-Fall wird der Pfeil längs des Wegs, der von der alten zur neuen Konfiguration führt, an der Grenze zweier Karten wie ein Lichtstrahl reflektiert. Da die Grenze im Vakuumtal einfach zu beschreiben ist, wird vor der Ausführung der Reflektion der Auftreffpunkt des Pfeiles in die 3-8-Ebene rotiert, danach der Wegpfeil reflektiert und alles wieder mit der inversen Drehung im Farbraum zurückrotiert.

Außerdem ist es schwierig, Projektoren zu finden, die auf Zustände mit ungeraden Randbedingungen zwischen zwei Potentialtöpfen projizieren. Dies führte dazu, daß nur die *mass gaps* der sich nach den irreduziblen Darstellungen von A_1^{++} , A_1^{+-} , E^{++} und E^{+-} transformierenden Zustände 'gemessen' werden konnten. Außerdem konnte das Programm noch nicht vektorisiert werden, und die Routinen zur Bestimmung der kinetischen Energie bzw. einer neuen Konfiguration sind noch zu rechenzeitintensiv. Unter diesen Bedingungen wurden, verglichen mit den Rechnungen für kleine Volumina, zwanzigmal weniger voneinander unabhängige Konfigurationen zur Auswertung erzeugt. Dementsprechend sind die Fehlerbalken der Ergebnisse noch sehr

groß.

Im Vergleich dazu zeigen die T_1^{+-} , T_2^{+-} , A_2^{--} , T_1^{--} , A_1^{+-} und T_2^{++} -Zustände mit 'geraden Randbedingungen', d. h. Zustände, die sog. 'elektrischen Fluß' tragen, ein besseres Verhalten des zeitlichen Abfalls der Korrelationsfunktionen der zugeordneten Meßoperatoren (in imaginärer Zeit), d. h. die statistischen Fluktuationen sind kleiner. Vergleicht man nun deren effektive *mass gaps* mit denen der Zustände, die mit der Variationsmethode erhalten wurden, so sieht man, daß diese, wie schon im SU(2)-Fall festgestellt wurde, meist unter den mL-Werten der Zustände ohne 'elektrischen Fluß' liegen. Da aber in einem Bereich der Kopplungskonstante g gemessen wurde, in dem die Tunnelaufspaltung noch nicht so groß ist, erwartet man auch, daß die Zustände mit beigemischtem 'elektrischen Fluß' sich nicht allzusehr von denen ohne 'elektrischen Fluß' unterscheiden. Diese Erwartung bestätigt sich.

Zusammenfassend kann man sagen, daß die Zeitgitter-Monte-Carlo-Methode eine wirkungsvolle Alternative zu den Variationsmethoden darstellt. Dies zeigen die Berechnungen fast aller *mass gaps* für reine SU(3)-Eichtheorie in kleinem Volumen, was via Reskalierung auch die Berücksichtigung masseloser Fermionen ermöglicht, und der Zustände mit 'geraden Randbedingungen' an den Grenzen des Einzugsgebiets eines Potentialtopfes für das sog. mittlere Volumen. Bevor die Pfadintegralmethode ihre ganze Leistungsfähigkeit auch für den SU(3)-Fall im mittleren Volumenbereich zeigen kann – nämlich durch Einbeziehung des durch die Fermionen erzeugten effektiven Potentials, womit die Rechnungen für die Quantenchromodynamik Relevanz erhalten – muß sie allerdings noch optimiert werden, z. B. durch schnellere Routinen für das Vorschlagen einer neuen Konfiguration und für die Berechnung der kinetischen Energie im Metropolis-Algorithmus, sowie der Entwicklung von Projektoren für Zustände mit 'ungeraden Randbedingungen'.

Allerdings wird das Projekt durch die Tatsache in Frage gestellt, daß Vohwinkel zeigen konnte, daß Michael's Methode im Kontinuumslimes verschwindenden Zeitschritts nicht genau die gleichen Ergebnisse liefert wie van Baals Variationsmethode mit den sog. adiabatischen Randbedingungen [34]. (Dies wird auch dadurch deutlich, daß die Versuche mit kleinerem Zeitschritt oder einer verbesserten Wirkung, die den durch den endlichen Zeitschritt bedingten Fehler reduzieren sollte, zu keiner Annäherung führte.) Man könnte vermuten, daß die Differenz zwischen den beiden Methoden durch die Kompaktheit des Konfigurationsraums verursacht wird. Um die Periodizität der Wellenfunktion auf dem Konfigurationsraum zu gewährleisten, muß eine Pfadintegration auch die Pfade mit höherer Windungszahl berücksichtigen. (Man vergleiche das einfache Problem des freien Teilchens auf einem Kreis [35][36].)

Zum Schluß ein kurzer Abriss des Inhalts der vorliegenden Arbeit:

Das erste Kapitel liefert etwas Hintergrundmaterial in Bezug auf Lüscher's effektiven Hamilton-Operator und ähnliche Versuche, die QCD in einem endlichen Volumen zu untersuchen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf dem Fall der Torustopologie mit periodischen Randbedingungen. Im zweiten Kapitel werden die technischen Details der verschiedenen Monte-Carlo-Methoden genauer erläutert, z. B. die bei ihrer Verwendung möglicherweise auftretenden systematischen Fehler als auch Methoden, um solche Fehler zu diagnostizieren, zu reduzieren oder zu eliminieren.

Die Pfadintegralmethode steht dabei im Mittelpunkt, aber auch andere Methoden, die der Variationsmethode ähnlicher sind, werden kurz vorgestellt. Außerdem werden exemplarische Anwendungen der Pfadintegral-Monte-Carlo-Methode vorgestellt, die zeigen sollen, wie diese Methode in Bereiche eindringt, bei denen die Zahl der Freiheitsgrade zwischen der der (Gitter-)Quantenfeldtheorie und der einfacher quantenmechanischer Systeme liegt.

Das dritte Kapitel präsentiert die Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen im kleinen Volumen

und den Vergleich mit den vorliegenden Variationsrechnungen. Diese Ergebnisse wurden bereits in einem Artikel publiziert [37].

Schließlich beschreibt das vierte Kapitel Michaels Monte-Carlo-Methode für SU(2) und den Versuch, die Monte Carlo-Methode im mittleren Volumen auch für SU(3) zur Anwendung zu bringen.

Da insbesondere die ersten beiden Kapitel Gegenstände behandeln, die den Experten wohl vertraut sind und nur dazu dienen, die Lesbarkeit der vorliegenden Arbeit zu erhöhen, wurden die einzelnen Kapitel bzw. Unterkapitel so gehalten, daß sie möglichst unabhängig voneinander zu lesen sind, so daß man nur ein bestimmtes (Unter-)kapitel lesen muß, wenn man sich über eine bestimmte angewandte Methode informieren will. Dies hat andererseits eine gewisse Redundanz des Inhalts der einzelnen (Unter-)kapitel zur Folge.

Abschließend eine Anmerkung zur Notation : Da sich einige englische Fachausdrücke nur schwer ins Deutsche übertragen lassen bzw. zu sehr unüblichen deutschen Bezeichnungen führen würden, wurden in der vorliegenden Arbeit in solchen Fällen die englischen Fachausdrücke beibehalten. Diese sind durch Kursivdruck hervorgehoben.

Kapitel 2

Eichtheorie in einem endlichen Volumen

Die Formulierung der Eichtheorie in einem endlichen Volumen hat den Vorteil, daß die möglichen Impulse nicht mehr jeden beliebigen Wert, sondern nur diskrete Werte annehmen können. Da man annimmt, daß das *confinement* ein 'Infraroteffekt' ist, kann man die Hoffnung haben, das Problem so auf eine kontrollierte Weise angehen zu können.

2.1 Toroidales Volumen

2.1.1 Periodische Randbedingungen

Das zu behandelnde System ist in einen Kasten mit den Abmessungen $L \times L \times L$ eingeschlossen. Die Zeit unterliegt keinen Einschränkungen. Daraus folgt, daß die Eigenwerte des Impulsoperators durch $p_i = (\frac{2\pi n}{L})$ gegeben sind, wobei n Element der ganzen Zahlen ist. Die räumlich konstanten Feldkomponenten haben $p_i = 0$, sie können aber zeitlich variieren, d. h. ihre Energie ist ungleich Null. (Da $E = p/c$ nicht erfüllt ist, liegen sie nicht "auf der Massenschale".) Man nennt diese Feldkomponenten Nullmoden. Wenn das Volumen sehr klein ist, sind die Nullmoden von den anderen, die im folgenden als Nichtnullmoden bezeichnet werden sollen, energetisch weit entfernt. Aus der Lagrangefunktion für die reine Eichtheorie liest man nach Fourierzerlegung die Wechselwirkung der verschiedenen Moden miteinander ab. Man kann versuchen, auch hier die sog. Born-Oppenheimer-Näherung anzuwenden, wobei die Nullmoden den sog. langsamen Moden bzw. Freiheitsgeraden und die Nichtnullmoden den schnellen Moden bzw. Freiheitsgraden entsprechen. Wenn man nach dieser Einteilung in schnelle und langsame Freiheitsgerade die schnellen ausintegriert, erhält man eine effektive Lagrangefunktion bzw. einen effektiven Hamiltonoperator für die langsamen Moden.

Aus der Torustopologie folgt aber auch eine nichttriviale Vakuumstruktur. Im folgenden sei immer die $A_0 = 0$ Eichung gewählt. Diese Eichfixierung läßt nur noch zeitunabhängige Eichtransformationen $g(\vec{x})$ zu. Periodische Randbedingungen auf dem Torus bedeuten für die Eichfelder

$$A_k(\vec{x} + L\hat{e}_i) = A_k(\vec{x}) . \quad (2-1)$$

(Dabei ist \hat{e}_i ein Einheitsvektor in i -Richtung. Dieser sollte nicht mit der später einzuführenden Komponente des sog. elektrischen Flusses in i -Richtung e_i verwechselt werden.) In der obigen

Gleichung wurde die Zeitabhängigkeit der Eichfelder unterdrückt. Außerdem sind die Eichfelder Lie-Algebra-wertig

$$A_k(\vec{x}, t) = A_k^a(\vec{x}, t)t^a. \quad (2-2)$$

Dabei sind t^a die Generatoren der Lie-Algebra, $a = 1, \dots, n^2 - 1$ für $SU(N)$. Im Falle von $SU(2)$ sind es $\sigma^a/2$ bzw. $\lambda^a/2$, wobei σ^a die drei Pauli-Matrizen und λ^a die acht Gell-Mann-Matrizen sind.

Durch die Torustopologie ist die Definition des klassischen Vakuums als dem Zustand kleinster Energie nicht mehr so einfach wie im Minkowskiraum. Eine Vakuumkonfiguration ist zeitunabhängig und bewirkt eine Minimierung der potentiellen Energie:

$$V(A) = \frac{1}{2g^2} \int_{T^3} d^3x \text{Tr}(F_{ij}^2(\vec{x})) \quad (2-3)$$

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i + i[A_i, A_j] \quad (2-4)$$

Da $V(A)$ positiv-semidefinit ist mit der unteren Grenze bei $A = 0$, sind die klassischen Feldkonfigurationen gegeben durch $F_{ij}(\vec{x}) = 0$. Dies ist erfüllt für räumlich konstante Felder, die nur Werte in der Cartanunteralgebra der $SU(N)$ Eichgruppe annehmen, d.h. abelsch sind. Im Gegensatz zum Minkowskiraum lassen sich Feldkonfiguration mit dem Betrag ungleich Null nicht durch eine Eichtransformation auf $A = 0$ zurückeichen, da man von den Eichtransformationen auf dem Torus auf jeden Fall fordern muß, daß sie periodisch sind. (Es sei denn, man führt wie t' Hooft die sog. Twistfunktionen $\Omega(\vec{x})$ ein [39], — siehe das nächste Kapitel über antisymmetrische Randbedingungen.)

$$g(\vec{x} + L\hat{e}_i) = g(\vec{x}) \quad (2-5)$$

$$[g]A_k(\vec{x}) = g(\vec{x})A_k(\vec{x})g(\vec{x})^{-1} - ig(\vec{x})\partial_k g(\vec{x})^{-1} \quad (2-6)$$

Dies hat zur Folge, daß eine Eichfunktion $g(\vec{x})$ nur Fouriermoden größer $2\pi/L$ enthält, um die man die diagonale Eichfeldkonfiguration dann verschieben kann.

Im allgemeinen bildet die Menge der Konfigurationen mit minimaler Energie einen $3r$ -dimensionalen Unterraum. Dabei bezeichnet r den Rang der Eichgruppe. Für $SU(N)$ ist einfach $r = (N - 1)$. Die Tatsache, daß es für nichtabelsche Eichtheorien auch Eichtransformationen $g: T^3 \rightarrow G$ (G bezeichnet die Eichgruppe) gibt, deren Homotopiegruppe nichttrivial ist, d. h. daß man sie durch ihren Pontryagin-Index P ($P \in Z$) klassifizieren kann

$$P = \frac{1}{24\pi^2} \int_{T^3} \epsilon_{ijk} \text{Tr}((g(\vec{x})\partial_i g(\vec{x})^{-1})(g(\vec{x})\partial_j g(\vec{x})^{-1})(g(\vec{x})\partial_k g(\vec{x})^{-1})), \quad (2-7)$$

führt dazu, daß die Menge der Vakuumkonfigurationen auch Teile enthält, die nicht einfach durch räumlich konstante, abelsche Vektorpotentiale beschrieben werden können. Diese verschiedenen Teile werden Vakuumtäler (oder auch Torontäler) genannt. Sie können ebenfalls durch P klassifiziert werden, wenn man sie sich durch eine homotopisch nichttriviale Eichtransformation mit eben diesem P aus dem homotopisch trivialen Teil erzeugt, und sind durch eine klassische Energiebarriere der Größenordnung $1/(Lg^2)$ voneinander getrennt. (Für den Bereich von g , in dem die im folgenden erwähnten störungstheoretischen Methoden zur Herleitung eines effektiven Hamiltonoperators für die 'langsamen' Moden gültig sind, sind die homotopisch nichttrivialen Komponenten des Vakuumtals vom homotopisch trivialen effektiv entkoppelt.)

Der $SU(2)$ -Fall stellt sich besonders einfach dar. Die räumlich konstanten und abelschen Feldkonfigurationen sind

$$A_i(x) = \frac{C_i \sigma_3}{L} \frac{1}{2}. \quad (2-8)$$

Die Menge dieser Feldkonfigurationen ist invariant unter abelschen periodischen und nichtabelschen konstanten Eichtransformationen, d.h. eine räumlich konstante abelsche Feldkonfiguration wird wieder in eine andere, aber ebenfalls räumlich konstante und abelsche überführt.

$$g_{\vec{k}}(\vec{x}) = \exp(-2\pi i \vec{x} \cdot \vec{k} \sigma_3 / L) \quad (2-9)$$

$$g_{-}(\vec{x}) = \sigma_1 \quad (2-10)$$

Diese Eichtransformationen bewirken die folgenden Transformationen der \vec{C} :

$$[g_{\vec{k}}](\vec{C}) = \vec{C} + 4\pi \vec{k} \quad (2-11)$$

$$[g_{-}](\vec{C}) = -\vec{C} \quad (2-12)$$

Der sog. elektrische Fluß

Man könnte nach der vorherigen Diskussion auf die Idee kommen, die Feldmoden, die Teil des Vakuums sind, als die "langsamen" Moden zu betrachten und die anderen Freiheitsgrade auszuintegrieren, um einen effektiven Hamiltonian für die "langsamen" Moden zu erhalten.

Andererseits ist der Punkt $A = 0$ des Vakuums verschieden von benachbarten Punkten des Vakuums, da diese Eichfeldkonfiguration nicht nur invariant unter konstanten abelschen Eichtransformationen ist, sondern unter *allen* konstanten Eichtransformationen. Dies führt zu sog. Nullmoden in den transversalen Fluktationen, wenn man versucht, die transversalen Freiheitsgrade einfach durch eine quadratische, d. h. Ein-Schleifennäherung auszuintegrieren, da das Potential um $A = 0$ eben quartisch in den räumlich konstanten Feldern c_i ist:

$$A_i(x) = \frac{c_i}{L} = \frac{c_i^a \sigma^a}{L \cdot 2} \quad (2-13)$$

$$V_{quartic} = -\frac{1}{2g^2 L} \text{Tr}([c_i, c_j]^2) . \quad (2-14)$$

Ein Ausweg aus diesem Dilemma ist, alle räumlich konstanten Feldkomponenten als "langsame" Moden zu betrachten und einen effektiven Hamiltonoperator für sie zu berechnen [20]. Das sich ergebende effektive Potential ist an der Stelle $A = 0$ am weitesten und verengt sich immer mehr, je weiter man in das sog. Vakuumtal kommt. Die Wellenfunktion bzw. das Wellenfunktional werden an jener Stelle ihr Maximum haben. Es gibt nun aber eine zusätzliche Symmetrie des Hamiltonoperators, die durch die Existenz einer speziellen Klasse von Eichtransformationen (von Lüscher "zentrale Konjugationen" getauft) bedingt ist:

$$h_{\vec{k}}(\vec{x}) = \exp\left(-2\pi i \frac{\vec{x} \cdot \vec{k} \sigma_3}{L \cdot 2}\right) \quad (2-15)$$

$$[h_{\vec{k}}](\vec{C}) = \vec{C} + 2\pi \vec{k} . \quad (2-16)$$

Zwar sind diese $h_{\vec{k}}$ nicht periodisch, aber die Periodizität der Eichpotentiale A_i bleibt trotzdem gewahrt, da die $h_{\vec{k}}$ periodisch bis auf ein Element des Zentrums Z_G der Eichgruppe G sind. Für $SU(2)$:

$$h_{\vec{k}}(\vec{x} + L\hat{e}_i) = (-1)^{k_i} h_{\vec{k}}(\vec{x}) . \quad (2-17)$$

Da das Zentrum der Gruppe per Definition mit allen Gruppenmitgliedern vertauscht, kann man es nach einer Anwendung von $h_{\vec{k}}$ auf A_i durchziehen, so daß A_i gar nicht verändert wird. Konsequenterweise muß auch der Hamiltonoperator in der Umgebung des zentral konjugierten

Punktes von $A_i = 0$ genauso aussehen, wie in der Umgebung von $A_i = 0$, d. h. das Potential muß weit sein, und die Wellenfunktion ist dort konzentriert. Man könnte also auch an diesem Punkt eine analoge Zerlegung in Nullmoden und Nichtnullmoden durchführen und einen effektiven Hamiltonoperator für die Nullmoden berechnen. Zusätzlich zu der Periodizität des Vakuums verursacht durch Eichkopien mit nichttrivialer Windungszahl – das sog. Θ -Vakuum – gibt es eine zusätzliche Periodizität, die durch sog. Quantenzahlen des elektrischen Flusses e_i ($e_i \in \{0, 1 \dots (N-1)\}$) gekennzeichnet wird:

$$\hat{\Psi}_{\vec{\varepsilon}, \theta}([g]A) = \exp(iP\theta) \hat{\Psi}_{\vec{\varepsilon}, \theta}(A), \quad (2-18)$$

$$\hat{\Psi}_{\vec{\varepsilon}, \theta}([h_{\vec{k}}]A) = \exp(2\pi i \vec{k} \cdot \vec{\varepsilon}/N) \hat{\Psi}_{\vec{\varepsilon}, \theta}(A). \quad (2-19)$$

Daß zumindest für den elektrischen Fluß die obigen Wellenfunktionen richtig konstruiert sind, zeigt folgende Betrachtung:

Lokal gesehen ist $h_{\vec{k}}$ nur eine Eichtransformation. Daraus folgt

$$H \hat{\Psi}[h_{\vec{k}}A] = H \hat{\Psi}[A]. \quad (2-20)$$

Da aber $h_{\vec{k}}$ nur quasi-periodisch ist; können *Polyakov-loops* nichttriviale Phasenfaktoren $\exp(\frac{2\pi i k_i}{N})$ ($(-1)^k$ im SU(2)-Fall) unter Anwendung der Eichtransformation aufnehmen. Dies führt zur Konstruktion von Wellenfunktionen (bzw. Wellenfunktionalen) mit definiertem elektrischen Fluß. Im Hilbertraum entsprechen den zentralen Konjugationen $h_{\vec{k}}$ unitäre Operatoren $U_{\vec{k}}$

$$U_{\vec{k}} \hat{\Psi}[A] \equiv \hat{\Psi}[h_{\vec{k}}^{-1}A] \quad (2-21)$$

mit den folgenden Eigenschaften:

$$U_{\vec{k}} U_{\vec{l}} = U_{\vec{k} \cdot \vec{l}}, \quad \vec{k} \cdot \vec{l} = (k_1 l_1, k_2 l_2, k_3 l_3) \quad (2-22)$$

$$[H, U_{\vec{k}}] = 0 \quad (2-23)$$

Aus (2-23) folgt, daß die zentralen Konjugationen bzw. ihre Hilbertraumoperatoren eine Gruppe bilden, die isomorph zu $Z_N \times Z_N \times Z_N$ ist, während (2-23) bedeutet, daß der Hamiltonoperator H und $U_{\vec{k}}$ beide gleichzeitig diagonalisiert werden können. Das heißt, der Hilbertraum zerfällt in Sektoren mit verschiedenen Eigenwerten von $U_{\vec{k}}$. Die Eigenvektoren sind dann irreduzible Darstellungen von Z_N^3 :

$$U_{\vec{k}} \hat{\Psi}_{\vec{\varepsilon}} = \exp\left\{\frac{2\pi i \vec{k} \cdot \vec{\varepsilon}}{N}\right\} \hat{\Psi}_{\vec{\varepsilon}}. \quad (2-24)$$

Daß die Bezeichnung elektrischer Fluß gerechtfertigt ist, sieht man aus der folgenden Argumentation: [8]

Der Erzeugungsoperator für eine Einheit des elektrischen Flusses entlang der Kurve K ist:

$$E(K) = \frac{1}{N} \text{Tr} P \exp\left\{-\int_K dx_k A_k(x)\right\}. \quad (2-25)$$

Dabei ist P der Pfadordnungsoperator entlang der Kurve K .

$$E_i = \frac{1}{N} \text{Tr} P \exp\left\{-\int_0^L dx_i A_i(x)\right\} \quad (2-26)$$

ist ein Paralleltransport fundamentaler Felder entlang der i -Richtung. Es muß sich daher unter Eichtransformationen als Operator in der fundamentalen Darstellung verhalten. Dies gibt für eine zentrale Konjugation $h_{\vec{k}}$:

$$\begin{aligned} E'_i &= h_{\vec{k}}(0) E_i h_{\vec{k}}^{-1}(L) \\ &= E_i \exp \left\{ \frac{2\pi i k_i}{N} \right\} \end{aligned} \quad (2-27)$$

bzw. im Hilbertraum

$$U_{\vec{k}}^{-1} E_i U_{\vec{k}} = E_i \exp \left\{ \frac{2\pi i k_i}{N} \right\}. \quad (2-28)$$

Daraus erhält man

$$U_{\vec{k}} E_i \hat{\Psi} = E_i U_{\vec{k}} \hat{\Psi} \exp \left\{ \frac{2\pi i k_i}{N} \right\}. \quad (2-29)$$

Wie man sieht, erhält man für jede Anwendung von E_i einen Faktor $\exp \left\{ \frac{2\pi i k_i}{N} \right\}$. Das heißt, $U_{\vec{k}}$ zählt, wie oft der Operator E_i auf einen Zustand Ψ angewandt wurde, und man muß e_i in 2-24 mit dem elektrischen Fluß in der i -ten Richtung identifizieren.

Der effektive Hamiltonian

[20] Wie oben schon erwähnt, versucht man, das quantenfeldtheoretische Problem unendlich vieler Freiheitsgrade auf ein quantenmechanisches endlich vieler Freiheitsgrade zu reduzieren, indem man eine Art Born-Oppenheimer-Ansatz wählt und die "Gesamtwellenfunktion" als ein Produkt aus einer Wellenfunktion $\Psi(c_i^a)$ für die räumlich konstanten Moden c_i^a und einem Produkt von Wellenfunktionen für die räumlich nicht-konstanten Moden, d. h. für die Moden mit nichtverschwindendem Impuls, zusammensetzt. Dieses Produkt von Wellenfunktionen für alle restlichen Freiheitsgrade q wird hier mit $\chi_{[c]}(q)$ bezeichnet. Dabei muß man beachten, daß diese Produktwellenfunktion ein Produkt von *Grundzustands*-Wellenfunktionen ist.

Dieser Ansatz erlaubt es, mit Hilfe der Blochschen Störungstheorie für entartete Zustände einen effektiven Hamiltonoperator (H_{eff}) zu konstruieren, dessen Eigenfunktion(en) dann $\Psi(c)$ sind. (Natürlich gibt es ein ganzes Spektrum von Energieeigenwerten dieses effektiven Hamiltonoperators und damit die zugehörigen Eigenfunktionen Ψ . Deren Klassifikation würde auch entsprechende Indizes für die $\Psi(c)$ erfordern, aber dies wird erst nach der Vorstellung des effektiven Hamiltonoperators erläutert werden.) Die Tatsache, daß bei der Herleitung des effektiven Hamiltonoperators eichfixierte Koordinaten im Konfigurationsraum verwendet wurden, nämlich die sog. Coulombbeugung $\partial_k A_k = 0$, führt zu einem nichttrivialen Integrationsmaß in der funktionalen Schrödingergleichung (das eng mit der Faddeev-Popov-Determinante zusammenhängt):

$$\rho(A) = \det'(-\partial_k D_k(A)). \quad (2-30)$$

Dabei bezeichnet $D_k(A)$ die kovariante Ableitung. Dieses Maß wurde in das Wellenfunktional integriert

$$\hat{\Psi}(A) = \rho(A)^{1/2} \tilde{\Psi}(A). \quad (2-31)$$

$$\hat{\Psi}(A) = \Psi(c) \chi_{[c]}(q). \quad (2-32)$$

Der effektive Hamiltonoperator ergibt sich dann aus der Blochschen Störungstheorie [20] oder Ausintegration der nichtkonstanten Feldmoden im Pfadintegral [23]:

$$\begin{aligned}
 L \cdot H_{eff}(c) &= -\frac{g^2}{2(1+\alpha_1 g^2)} \sum_{i,a} \frac{\partial^2}{\partial c_i^{a2}} + V_T(c) + V_{l,1}(c) + V_{l,2}(c) \quad (2-33) \\
 V_{l,1}(c) &= \frac{4}{\pi^2} \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} \frac{\sin^2(\vec{n} \cdot \vec{r}/2)}{(\vec{n}^2)^2} - 2|\vec{r}| \\
 V_{l,2}(c) &= \frac{g^2(L)}{32} [(\Delta V_{l,1}(c))^2 + 2\Delta V_{l,1}(c)\Delta V_{l,1}(0)] \\
 V_T(c) &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{g^2} + \alpha_2 \right) \sum_{ij,a} F_{ij}^{a2} \\
 &\quad + \alpha_3 \sum_{ijk,a} r_i^2 F_{jk}^{a2} + \alpha_4 \sum_{ij,a} r_i^2 F_{ij}^{a2} + \alpha_5 \det^2 c
 \end{aligned}$$

Dabei ist $\Delta = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$, $r_i = \sqrt{\sum_{a=1}^3 c_i^a c_i^a}$ sind wieder die eichinvarianten "Radialkoordinaten" und $F_{ij}^a = -\epsilon_{abd} c_i^b c_j^d$ für SU(2) bzw. $F_{ij}^a = -f_{abd} c_i^b c_j^d$ für SU(3). Die Kopplungskonstante g ist die renormierte Kopplung $g(L)$ bei der (Energieskala) $\mu = 1/L$. In Zweischleifennäherung gilt (für kleine L):

$$g^{-2}(L) = -\frac{11}{12\pi^2} \ln(L\Lambda_{MS}) - \frac{51}{121} \ln(-2 \ln(L\Lambda_{MS})) + \dots \quad (2-34)$$

Der sog. transversale Potentialteil verschwindet, wenn $F_{ij}^a = 0$ ist, d. h. wenn c_i^a im Vakuumtal liegt. Der verbleibende Potentialteil $V_{l,1}(c) + 2|\vec{r}|$ ist das effektive Potential in Einschleifennäherung entlang des Vakuumtals. Den $2|\vec{r}|$ -Term erhält man durch die Ausintegration der transversalen räumlich konstanten Moden. (Da hier die transversalen räumlich konstanten Moden nicht ausintegriert wurden, dies aber in der Berechnung des Ausdrucks, der die Sinusterme aufsummiert, getan wurde, muß er nachträglich abgezogen werden.) Dies ist aber, wie gesagt, nur möglich an Punkten des Vakuumtals, für die gilt $|\vec{r}| \gg g^{\frac{2}{3}}$ [23], da nahe $A = 0$ aufgrund der quartischen Form der potentiellen Energie $(F_{ij}^a)^2$ für die Nullmoden (da die Ableitungen in diesem Fall wegfallen und nur der Kommutatorterm für die Feldstärken überbleibt,) es keine Trennung der Energie- bzw. Zeitskalen für die abelschen und nichtabelschen Moden gibt. In einiger Entfernung von $A = 0$ kann man die Dynamik weiter reduzieren auf eine Dynamik entlang des Vakuumtals, aber nahe $A = 0$ und seinen eichäquivalenten Punkten unter zentralen Konjugationen bricht die sog. "adiabatische" Näherung zusammen.

Wenn man die beiden V_l -Terme in Potenzen von c_i^a entwickelt, erhält man eine Form, die für die (Computer-)Auswertung besser geeignet ist. Meist reicht die Entwicklung bis zur sechsten Ordnung aus, um eine genügende Genauigkeit zu erreichen.

$$\begin{aligned}
 L \cdot H_{eff}(c) &= -\frac{g^2}{2(1+\alpha_1 g^2)} \sum_{i,a} \frac{\partial^2}{\partial c_i^{a2}} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{g^2} + \alpha_2 \right) \sum_{ij,a} F_{ij}^{a2} \quad (2-35) \\
 &\quad + \gamma_1 \sum_i r_i^2 + \gamma_2 \sum_i r_i^4 + \gamma_3 \sum_{i>j} r_i^2 r_j^2 + \gamma_4 \sum_i r_i^6 + \gamma_5 \sum_{i \neq j} r_i^2 r_j^4 + \gamma_6 \prod_i r_i^2 \\
 &\quad + \alpha_3 \sum_{ijk,a} r_i^2 F_{jk}^{a2} + \alpha_4 \sum_{ij,a} r_i^2 F_{ij}^{a2} + \alpha_5 \det^2 c
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= -3.0104661 \cdot 10^{-1} - (g/2\pi)^2 \cdot 3.0104661 \cdot 10^{-1}, \quad \alpha_1 = +2.1810429 \cdot 10^{-2}, \quad (2-36) \\
\gamma_2 &= -1.4488847 \cdot 10^{-3} - (g/2\pi)^2 \cdot 9.9096768 \cdot 10^{-3}, \quad \alpha_2 = +7.5714590 \cdot 10^{-3}, \\
\gamma_3 &= +1.2790086 \cdot 10^{-2} + (g/2\pi)^2 \cdot 3.6765224 \cdot 10^{-2}, \quad \alpha_3 = +1.1130266 \cdot 10^{-4}, \\
\gamma_4 &= +4.9676959 \cdot 10^{-5} + (g/2\pi)^2 \cdot 5.2925358 \cdot 10^{-5}, \quad \alpha_4 = -2.1475176 \cdot 10^{-4}, \\
\gamma_5 &= -5.5172502 \cdot 10^{-5} + (g/2\pi)^2 \cdot 1.8496841 \cdot 10^{-4}, \quad \alpha_5 = -1.2775652 \cdot 10^{-3}, \\
\gamma_6 &= -1.2423581 \cdot 10^{-3} - (g/2\pi)^2 \cdot 5.7110724 \cdot 10^{-3}.
\end{aligned}$$

Bei der Berechnung des Spektrums des obigen effektiven-Hamiltonoperators interessiert vor allen Dingen das sog. tiefliegende Spektrum, d. h. die Energiewerte, für die gilt $LE \rightarrow 0$ für $g \rightarrow 0$. Die Grundstruktur des Spektrums wird dabei für sehr kleine g schon durch den effektiven Hamiltonoperator in niedrigster nichttrivaler Ordnung in g bestimmt:

$$L \cdot H_{eff}(c) = -\frac{g^2}{2} \sum_{i,a} \frac{\partial^2}{\partial c_i^{a2}} - \frac{1}{2g^2} Tr([c_i, c_j]). \quad (2-37)$$

Für kleine g wird das Potential im Vakuumtal so eng, d. h. das Potential wächst bei Abweichung vom Vakuumtal so steil an, daß durch die Nullpunktsfluktuationen der transversalen (Null)-Moden ein effektiver Potentialberg entlang des Vakuumtals induziert wird. Dieser kann zwar durch "Tunneln" überwunden werden (siehe das nächste Unterkapitel), aber für $g \ll 1$ ist er so hoch, daß auch Tunnelprozesse kaum vorkommen. Die einzelnen Quantenvakua sind dann praktisch entkoppelt, d. h. ihre Spektren sind entartet. Man kann das Spektrum mit der Raleigh-Ritz-Variationsmethode für den um $A = 0$ gelegenen Potentialtopf bestimmen [21, 40, 10]. Da der effektive Hamiltonoperator nur noch kubische Symmetrie hat, klassifiziert man die Eigenzustände nach den irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe. Es stellt sich heraus, daß nicht, wie erwartet, der A_1^+ -Zustand, der im Limes großen Volumens, wenn die Rotationsinvarianz wieder hergestellt ist, zum skalaren *glueball* wird, der niedrigste Zustand über dem Grundzustand ist, sondern der E^+ -Zustand, der im Limes großen Volumens mit dem T_2^+ -Zustand zum Spin-2-Zustand kombinieren würde. Der T_2^+ -Zustand ist im Bereich kleiner g entartet mit dem E^+ -Zustand, da der Einfluß des die Rotationinvarianz brechenden Terms im effektiven Potential noch klein ist. Die Differenz zwischen dem Grundzustand und dem jeweiligen Zustand, der sich nach einer irreduziblen Darstellung der Würfelgruppe transformiert, nennt man *mass gap* m . Die dimensionslose Größe $z = m \cdot L$ mißt die Länge des Torus in Einheiten der Compton-Wellenlänge des *mass gaps*. Solange z_{E^+} kleiner als ungefähr 1 ist, tritt kein Tunneln auf. Man nennt diesen Längenbereich den Bereich kleinen Volumens. Für größere g und damit z wird das Tunneln zwischen den einzelnen Vakua spürbar. Die jeweils zu N^3 entarteten Zustände spalten auf. Die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand des $\vec{k} = (0, 0, 0)$ -Vakuums und dem mit $\vec{k} = (1, 0, 0)$ wird als die Energie einer Einheit elektrischen Flusses bezeichnet.

Tunneln und Randbedingungen

Beim eindimensionalen *double well*-Potential können die Eigenfunktionen leicht in gerade und ungerade eingeteilt werden. Sie unterscheiden sich durch ihr Verhalten am Ursprung: Während die symmetrischen (geraden) Eigenfunktionen dort eine verschwindende Ableitung haben müssen, sind die ungeraden (antisymmetrischen) gezwungen, durch Null zu gehen. Man kann also, anstatt

die Eigenfunktionen auf ganz \mathbb{R} zu berechnen, sich auf \mathbb{R}^+ beschränken und an die Wellenfunktionen die Anforderung stellen, am Ursprung Dirichlet oder von Neumann Randbedingungen zu gehorchen. Der Hilbertraum (der quadratintegrablen Funktionen) mit definierter Parität auf ganz \mathbb{R} zerfällt also in zwei Unterräume, die durch die Forderung charakterisiert werden können, quadratintegrabel auf $\mathbb{R}^+ = \{x|x > 0\}$ zu sein und den beiden oben erwähnten Randbedingungen zu gehorchen: $\mathcal{H} = \mathcal{H}^+ \oplus \mathcal{H}^-$, $\mathcal{H}^+ = \{\Psi \in L^2(\mathbb{R}^+) | \partial_x \Psi(0) = 0\}$, $\mathcal{H}^- = \{\Psi \in L^2(\mathbb{R}^+) | \Psi(0) = 0\}$. Für kleine Tunnelaufspaltung bilden sich im Spektrum Doublets aus Eigenwerten, die symmetrischen und antisymmetrischen Eigenfunktionen zugeordnet sind.

Diese Methode läßt sich nun auf die Vakuumentartung unter den zentralen Konjugationen übertragen. Dabei entspricht der Symmetrieeoperation Parität $x \rightarrow -x$ die Eichtransformation $h_{\vec{k}}$, denn so wie der *double well*-Hamiltonoperator invariant unter der Anwendung der Paritätsoperation ist, ist der Hamiltonoperator der Eichtheorie invariant unter der Anwendung der zentralen Konjugationen. Daher sollte auch der effektive Hamiltonoperator in der Umgebung eines jeden Quantenvakuums gleich aussehen. Da wir auch wissen, wie die Symmetrien auf die Vakuumtalkoordinaten C_i wirken, könnte man versuchen, eine effektive Vakuumtal-Wellenfunktion zu konstruieren und im Vakuumtal die gleichen Forderungen an die Symmetrie der Wellenfunktion am Symmetriepunkt zu stellen, wie im Fall des *double well*-Oszillators am Ursprung. Andererseits ist eine effektive Wellenfunktion nur auf dem Vakuumtal nicht möglich wegen des quartischen Potentials an den Quantenvakua. Aber abseits der Quantenvakua innerhalb des Vakuumtals ist das Potential auch für transversale konstante Moden quadratisch. Es ist deshalb möglich, jedem Quantenvakuum einen Koordinatenbereich zuzuordnen und die Randbedingungen an der Überlappstelle zweier Koordinatenbereiche festzulegen, d. h. bei $C_i = +/ - \pi$. Wenn man eine derartige Aufteilung für den hier vorliegenden drei-dimensionalen Fall verallgemeinert, so ergibt sich, wenn sog. Ein-Teilchen-Paritäten π_i für jede Raumrichtung eingeführt werden, für die Felder A_k : [8]

$$\begin{aligned} \pi_i x_k &= (-1)^{\delta_{ik}} x_k \\ \pi_i A_k(\vec{x}) &= (-1)^{\delta_{ik}} A_k(\pi_i \vec{x}) \end{aligned} \quad (2-38)$$

Für die auf das Vakuumtal eingeschränkte Wellenfunktion $\Phi(\vec{C})$ gilt:

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{C} + 2\pi\vec{k}) &= (-1)^{\vec{k}\cdot\vec{e}} \Phi(\vec{C}) \\ \Phi(\pi\vec{C}) &= p_i \Phi(\vec{C}) . \end{aligned} \quad (2-39)$$

Daraus folgt an den Grenzen $C_i = \pi$:

$$\begin{aligned} \Phi(C_i = \pi) &= 0 \text{ für } p_i(-1)^{e_i} = -1 \\ \frac{\partial \Phi}{\partial C_i}(C_i = \pi) &= 0 \text{ für } p_i(-1)^{e_i} = 1 . \end{aligned} \quad (2-40)$$

Die obige Argumentation vernachlässigt die Tatsache, daß der effektive Hamiltonoperator invariant unter globalen, konstanten Eichtransformationen ist. Das Vakuumtal muß nicht unbedingt in σ_3 -Richtung liegen. Die Bedingung für das Vorliegen einer Vakuumkonfiguration ist nur die Parallelität der c_i^a im Farbraum. Es empfiehlt sich also, für die c_i^a Kugelkoordinaten einzuführen und die Diskussion auf der Ebene der $\Psi(c_i^a)$ zu wiederholen:

$$\begin{aligned} c_i^1 &= c_i \sin(\theta_i) \cos(\phi_i) \\ c_i^2 &= c_i \sin(\theta_i) \sin(\phi_i) \\ c_i^3 &= c_i \cos(\theta_i) \end{aligned} \quad (2-41)$$

Die Argumente der Wellenfunktion sind dann:

$$\Psi(\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3) = \Psi(c_1, c_2, c_3, \theta, \phi) . \quad (2-42)$$

Dabei wurden alle θ_i und ϕ_i kollektiv mit θ, ϕ bezeichnet. Bei einer zentralen Konjugation in x-Richtung transformiert sich die Wellenfunktion nun wie folgt:

$$(c_1 + 2\pi k_1)\Psi(c_1 + 2\pi k_1, c_2, c_3, \theta, \phi) = (-1)^{k_1 e_1} c_1 \Psi(c_1, c_2, c_3, \theta, \phi) . \quad (2-43)$$

Der c_1 -Faktor vor Ψ kommt aus dem $c_1 c_2 c_3$ -Faktor, der aus dem Integrationsmaß für Kugelkoordinaten stammt, und den man eingeführt hat, da man eigentlich die Kontinuität der Wahrscheinlichkeitsdichte betrachtet [8].

Aufgrund der Symmetrie des Hamiltonoperators müssen sich die Wellenfunktionen wie irreduzible Darstellungen der Würfelgruppe transformieren. Man kann die Eigenfunktionen so wählen, das gilt

$$\Psi(\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3) = p_1 \Psi(-\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3) = p_2 \Psi(\vec{c}_1, -\vec{c}_2, \vec{c}_3) = p_3 \Psi(\vec{c}_1, \vec{c}_2, -\vec{c}_3) . \quad (2-44)$$

Dabei bezeichnen p_i die Eigenwerte der sog. 'Einteilchen-Parität', die sich aus der normalen Paritätsoperation kombiniert mit einer Rotation um π um eine Achse zusammensetzt. (Der Faktor $c_1 c_2 c_3$ des Integrationsmaßes ändert sich dabei nicht.)

Kombiniert man nun eine zentrale Konjugation mit einer Reflektion eines der c_i , z. B. c_1 , so erhält man

$$\begin{aligned} & (2\pi k_1 - c_1)\Psi(2\pi k_1 - c_1, c_2, c_3, \theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, \theta_3, \phi_3) \\ &= (-1)^{k_1 e_1} c_1 \Psi(c_1, c_2, c_3, \pi - \theta_1, -\phi_1, \theta_2, \phi_2, \theta_3, \phi_3) \\ &= p_1 (-1)^{k_1 e_1} c_1 \Psi(c_1, c_2, c_3, \theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, \theta_3, \phi_3) . \end{aligned} \quad (2-45)$$

Die Wellenfunktion soll bei $c_1 = \pi$ glatt sein, d. h. die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung sollten stetig sein. Dies führt zu den Bedingungen

$$\begin{aligned} \Psi(\pi, c_2, c_3, \theta, \phi) &= p_1 (-1)^{k_1 e_1} \Psi(\pi, c_2, c_3, \theta, \phi) \\ \frac{\partial}{\partial c_1} (c_1 \Psi(\pi, c_2, c_3, \theta, \phi))|_{c_1=\pi} &= p_1 (-1)^{k_1 e_1} c_1 \frac{\partial}{\partial c_1} (c_1 \Psi(\pi, c_2, c_3, \theta, \phi))|_{c_1=\pi} . \end{aligned} \quad (2-46)$$

Das Spektrum wird berechnet, indem man durch Linearkombination von ebenen Wellen oder harmonischen Oszillatorfunktionen Wellenfunktionen mit den obengenannten Symmetrien bildet, die zudem eichinvariant und Darstellungen der Würfelgruppe sein müssen, und die Koeffizienten der Linearkombination mit Hilfe des Raleigh-Ritz-Variationsverfahrens bestimmt. Charakteristisch für das Spektrum im sog. mittleren Volumenbereich ist die Aufspaltung der E - und T_2 -Zustände, wobei die T_2 -Zustände stets weit über den entsprechenden E -Zuständen liegen [23, 24]. Die Ergebnisse stimmen gut mit dem in Monte-Carlo-Rechnungen auf dem Raum-Zeit-Gitter erhalten überein, wenn die dimensionslose Skalierungsvariable $z = m \cdot L$ benutzt wird, wobei m der *mass gap* ist [41, 42, 8].

Die Übereinstimmung wird praktisch perfekt, wenn man die analytische Herleitung des effektiven Hamiltons auf dem Gitter wiederholt und so einen effektiven Hamilton-Operator erhält, dessen Koeffizienten (z. B. des effektiven Potentials) von der Anzahl der Gitterpunkte abhängen [25].

2.1.2 Antiperiodische Randbedingungen

Auf dem Torus muß man nicht fordern, daß das Eichfeld A_μ periodisch ist, sondern nur periodisch bis auf eine Eichtransformation [43]. Dies bezeichnet man als verdrehte oder sog. *twisted* Randbedingungen. Es wird sich noch zeigen, daß dadurch die Nullmoden, die auf dem Torus mit periodischen Randbedingungen auftauchen, eliminiert werden. Als Vorteil der *twisted* Randbedingungen wird angeführt, daß mit ihnen das Vakuum im kleinen Volumen dem "wahren" Vakuum im Limes unendlich großen Volumens ähnlicher, nämlich ebenfalls "ungeordnet", ist, und somit der Übergang vom kleinen zum großen Volumen glatter verläuft.

$$\begin{aligned} A_i(\vec{x} + L\hat{e}_k) &= \Omega_{(k)}^\dagger A_i(\vec{x})\Omega_{(k)} + i\Omega_{(k)}^\dagger \partial_i \Omega_{(k)} \\ A_0(\vec{x} + L\hat{e}_k) &= \Omega_{(k)}^\dagger A_0(\vec{x})\Omega_{(k)} \end{aligned} \quad (2-47)$$

Die $\Omega_{(k)}$ ($k=1,2,3$) sind Eichtransformationen, die nur von den zu x_k orthogonalen Koordinaten abhängen. Aus der Tatsache, daß der Wert des Vektorpotentials eindeutig bestimmt sein muß, folgt

$$\Omega_{(1)}(x_2 = 0, x_3)\Omega_{(2)}(x_1 = L, x_3)\Omega_{(1)}^\dagger(x_2 = L, x_3)\Omega_{(2)}^\dagger(x_1 = 0, x_3) = \exp(in_{12}2\pi/N) \quad (2-48)$$

und ähnlich für alle anderen (ij)-Ebenen. Der sog. twist-Tensor η_{ij} [43] hat nur ganzzahlige Komponenten modulo N . (Andere Autoren ([44, 45]) bezeichnen $z_{ij} = \exp(i\eta_{ij}2\pi/N)$ als twist-Tensor.) Man führt einen Vektor für den sog. magnetischen Fluß ein [39]:

$$m_k = \frac{1}{2}\epsilon_{klm}n_{lm} . \quad (2-49)$$

Unter einer glatten, nicht notwendigerweise periodischen Eichtransformation $\Omega(\vec{x})$ gilt

$$\begin{aligned} A_i(\vec{x}) \rightarrow A_i(\vec{x})' &= \Omega^\dagger(\vec{x})A_i(\vec{x})\Omega(\vec{x}) + i\Omega^\dagger(\vec{x})\partial_i\Omega(\vec{x}) \\ A_0(\vec{x}) \rightarrow A_0(\vec{x})' &= \Omega^\dagger(\vec{x})A_0(\vec{x})\Omega(\vec{x}) , \end{aligned} \quad (2-50)$$

$$\Omega'_{(k)} = \Omega^\dagger(\vec{x})\Omega_{(k)}\Omega(\vec{x} + L\hat{e}_k) . \quad (2-51)$$

Man kann zeigen, daß es immer eine Eichtransformation gibt, die die $\Omega'_{(k)}$ in Gleichung (2-51) in räumlich konstante Funktionen verwandelt. Diese konstanten Matrizen seien mit Γ_i bezeichnet. (Die spezielle Form der $\Gamma_i \in SU(2)$ Matrizen ist physikalisch irrelevant, nur der Wert von \vec{m} spielt eine Rolle. Wenn $\vec{m} = 0$ ist, kann man die Γ_i natürlich als Einheitsmatrizen wählen und hat wieder den Fall periodischer Randbedingungen.) Es gilt

$$\Gamma_i\Gamma_j = \exp(\pi i\epsilon^{ijk}m_k)\Gamma_j\Gamma_i . \quad (2-52)$$

Das Vektorpotential A_i und die elektrische Feldstärke als seine kanonisch konjugierte Variable unterliegen dann den Randbedingungen:

$$A_i(\vec{x} + L\hat{e}_k) = \Gamma_k A_i(\vec{x})\Gamma_k^\dagger \quad (2-53)$$

$$E_i(\vec{x} + L\hat{e}_k) = \Gamma_k E_i(\vec{x})\Gamma_k^\dagger . \quad (2-54)$$

Die folgende Diskussion beschränkt sich auf einen besonders einfachen Fall, nämlich den der Eichgruppe $SU(2)$ mit $\vec{m} = (1, 1, 1)$. Man wählt bevorzugt $\vec{m} = (1, 1, 1)$, da dann die kubische Symmetrie des Problems erhalten bleibt, denn \vec{m} ist definiert modulo N , in diesem Fall also 2, so daß kubisch rotierte \vec{m} 's äquivalent zum ursprünglichen sind. Dies ermöglicht einen besseren Vergleich mit dem Fall periodischer Randbedingungen, da z. B. *Glueball*-Zustände nach den irreduziblen Darstellungen der kubischen Gruppe klassifiziert werden können. (Außerdem kann man noch die Parität betrachten. Auch diese Symmetrie wird durch den twist $\vec{m} = (1, 1, 1)$ nicht zerstört.) Man wählt folgende *twists*:

$$A_i(\vec{x} + L\hat{e}_k) = i\sigma_k A_i(\vec{x})(i\sigma_k)^\dagger \quad k=1,2,3 \quad (2-55)$$

Dies impliziert für die einzelnen Farbkomponenten von A :

$$A^a(\vec{x} + L\hat{e}_k) = A^a(\vec{x}) \quad \text{für } k = a \quad (2-56)$$

$$A^a(\vec{x} + L\hat{e}_k) = -A^a(\vec{x}) \quad \text{für } k \neq a \quad (2-57)$$

Jede Isospin- bzw. Farbkomponente a definiert einen Dreiervektor $\vec{f}_{(a)}$ mit Komponente 0 in Richtung a und Betrag der anderen Komponenten $1/2$. Das Fourierspektrum hat also die Form:

$$\vec{p} = \frac{2\pi}{L}(\vec{n} + \vec{f}_{(a)}) \quad (2-58)$$

Dabei ist \vec{n} ganzzahlig und $\vec{f}_{(1)} = (0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$, $\vec{f}_{(2)} = (-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2})$, $\vec{f}_{(3)} = (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0)$. Offensichtlich sind Nullmoden mit $\vec{p} = (0, 0, 0)$ nicht mehr möglich.

Das Spektrum für kleine Volumina

Man zerlegt nun den Hamiltonoperator in einen freien Teil und einen wechselwirkenden Teil. In Coulomb-Eichung erhält man:

$$H = H_{frei} + g \int d^3x Tr \partial_k A_l [A_k, A_l] \quad (2-59)$$

$$-g^2 \int d^3x Tr [A_k, A_l][A_k, A_l] + g^2 \int d^3x Tr [E_k, A_k] \frac{1}{\Delta} [E_l, A_l]$$

mit

$$H_{frei} = \sum_{\vec{f}, \vec{n}, \sigma} |\vec{p}| a^\dagger(\vec{f}, \vec{p}, \sigma) a(\vec{f}, \vec{p}, \sigma) \quad (2-60)$$

In der obigen Formel bezeichnen a und a^\dagger Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren für Gluonen mit Polarisation σ und Impuls \vec{p} .

Bis zur Ordnung g^2 ergibt sich für die 24 möglichen Zwei-Gluonen-Zustände, die sich in irreduzible Darstellungen der kubischen Gruppe einteilen lassen $2(A_1^+ \oplus E^+ \oplus T_2^+) \oplus (T_1^+ \oplus T_2^+) \oplus (A_1^- \oplus E^- \oplus T_2^-)$:

$$E = (\sqrt{2}2\pi/L) + (g^2/12\pi^2 L)X + O(g^4), \quad (2-61)$$

wobei X ein für die jeweilige irreduzible Darstellung spezifischer Faktor ist, der die Aufspaltung zur Ordnung g^2 quantifiziert [43, 46, 47, 48]. Ein Vergleich mit den Ergebnissen bei periodischen

Randbedingungen ist schwierig, da man erwartet, daß die g^4 Korrekturen wesentliche (circa 25%) Beiträge liefern werden, aber es deutet sich an, daß z. B. die Aufspaltung zwischen dem T_2^+ - und E^+ -Zustand nicht so stark ist wie bei periodischen Randbedingungen im mittleren Volumen. Außerdem ist im Gegensatz zu dem Fall periodischer Randbedingungen hier der Massgap immer der ein A_1^+ -Zustand. Allerdings sind die Zustände mit negativer Parität beinahe entartet mit denen positiver Parität.

Dies wird auch durch Monte-Carlo-Rechnungen auf einem Gitter mit *twisted* Randbedingungen bestätigt [49], die in einem β -Bereich von 2.5 bis 4.7 durchgeführt wurden. Für die Zustände positiver Parität sieht man qualitative Übereinstimmung in dem Sinne, daß die Störungsrechnungsergebnisse den Monte-Carlo-Daten angepaßt werden können, wenn man eine Reskalierung der Kopplungskonstante vornimmt. Quantitative Übereinstimmung im Rahmen der Fehler wird nur bei $\beta = 4.7$, d. h. der niedrigsten Kopplung auf dem Gitter, erreicht.

Eine Wiederholung der analytischen Rechnungen auf dem Gitter ergibt nur unwesentliche Korrekturen durch endlichen Gitterabstand. Im allgemeinen sind $O(a^2)$ Effekte sogar für $l = 4$ klein, wenn die Toruslänge gegeben ist durch $L = la$, $l \in N$. Dies gilt allerdings nicht für die Zustände mit negativer Parität wie A_1^- und E^- , deren $O(g^2)$ Verschiebungen bei $l = 4$ beträchtliche Gitterkorrekturen erfahren. [48].

Der Übergang zu großen Volumina

Auch unter *twisted* Randbedingungen zerfällt der physikalische Hilbertraum in Sektoren mit verschiedenem elektrischen Fluß e_i . Diese sind Darstellungen der Gruppe der singulären Eichtransformationen, die periodisch sind modulo eines Elements des Zentrums der Eichgruppe $Z(N)$. Bei Anwesenheit von magnetischem Fluß \vec{m} erhält ein Zustand mit elektrischem Fluß \vec{e} einen "Pointing-Impuls"

$$\vec{p}_c = \frac{2\pi}{NL} (\vec{e} \times \vec{m}) . \quad (2-62)$$

Da hier immer $\vec{m} = (1, 1, 1)$ vorausgesetzt wurde, führt dies dazu, daß nicht mehr alle elektrischen Flußsektoren störungstheoretisch entartet sind, wie im Fall periodischer Randbedingungen, sondern nur noch der $\vec{e} = (0, 0, 0)$ - und der $\vec{e} = (1, 1, 1)$ -Sektor. Die Entartung zwischen diesen beiden Sektoren wird nur durch ("Instanton"-)Tunneln aufgehoben. Um dieses nichtstörungstheoretische Phänomen untersuchen zu können, simulierten González-Arroyo und Mitarbeiter die Gittereichtheorie auf einem (3+1)-dim. Gitter mit *twisted* Randbedingungen in *allen* Richtungen. Der twist-Tensor ist dann 4-dimensional $\eta_{\mu\nu}$, wobei wieder die Raumkomponenten den magnetischen Fluß charakterisieren $\eta_{ij} = \sum_k \epsilon_{ijk} m_k$, während die restlichen Komponenten in einem Vektor \vec{k} zusammengefaßt werden $k_i = \eta_{0i}$. Für *twisted* Randbedingungen ergibt der Ausdruck für die Instantonen-Anzahl unter Umständen nicht mehr ganzzahlige Werte [39]:

$$Q = \frac{1}{16\pi^2} \int_{Torus} Tr(F^{\mu\nu} \tilde{F}_{\mu\nu}) d^4x = \nu - \frac{\kappa}{N} . \quad (2-63)$$

Dabei sind ν und κ ganze Zahlen, $F^{\mu\nu}$ der Feldstärke-Tensor in fundamentaler Darstellung und $\tilde{F}_{\mu\nu}$ der zugeordnete duale. Für κ ergibt sich:

$$\kappa = \frac{1}{4} \eta_{\mu\nu} \tilde{\eta}_{\mu\nu} = \vec{k} \cdot \vec{m} . \quad (2-64)$$

Man bezeichnet den Fall, in dem κ modulo N verschwindet, als "orthogonalen" *twist* und $\kappa \neq 0$ als nicht-orthogonalen *twist*.

Da es eine untere Grenze für die Wirkung der Eichfelder in Abhängigkeit von der Windungszahl gibt, sieht man, daß es für den hier interessierenden nicht-orthogonalen Fall keine Konfiguration mit verschwindender Wirkung gibt.

$$S = \frac{1}{2} \int_{\text{Torus}} \text{Tr}(F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}) d^4x \geq 8\pi^2 \left| \nu - \frac{\kappa}{N} \right| \quad (2-65)$$

Mit Hilfe einer verbesserten *Cooling*-Methode [50, 51] wurde auf einem anisotropen Gittertorus $l_s \cdot l_t$ nach Feldkonfigurationen mit minimaler Wirkung gesucht – in diesem Fall mit $Q=1/2$ – [52, 53, 54, 55, 56, 57, 58]. Diese werden, obwohl sie nur halbzahlige topologische Ladung haben, ebenfalls Instantonen genannt, da die Anwesenheit eines *twists* in der Zeit mit $\vec{e} = (1, 1, 1)$ interpretiert werden kann als die Anwendung eines Generators der nichtorthogonalen, singulären Eichtransformationen. Dadurch kann man eine vierdimensionale, raum-zeitliche Konfiguration mit *twist* $\vec{m} = \vec{k} = (1, 1, 1)$ auf einem Torus mit der Periodenlänge l_t in Zeitrichtung als eine klassische euklidische Zeitevolution von einer Konfiguration zum Zeitpunkt $t = 0$ zu ihrer singular transformierten zum Zeitpunkt l_t betrachten. Wenn die minimale Wirkung endlich bleibt für $l_t \rightarrow \infty$, kann man erwarten, daß für die meiste Zeit die Energiedichte nahe Null bleibt und damit die räumliche Konfiguration beinahe der eines klassischen Vakuums entspricht. Da man dann für $l_t \rightarrow \infty$ anscheinend eine näherungsweise Lösung der klassischen Bewegungsgleichung in euklidischer Zeit hat, die sich von einem Vakuum ins andere entwickelt, ist der Name "Instanton" gerechtfertigt.

In der Monte-Carlo-Simulation konnte für l_t natürlich nicht eine unendliche Zeitausdehnung des Gitters simuliert werden, sondern man mußte sich mit einem l_s/l_t -Verhältnis von 2 begnügen. Trotzdem findet man nach *cooling* ungefähr selbstduale und anti-selbstduale Konfigurationen mit $Q = 1/2$ und $S \approx 4\pi^2$. Die Konfigurationen sind lokalisiert in der Zeit, und ihre Zeitausdehnung wird durch l_s bestimmt.

Das Ziel der Untersuchungen ist die Berechnung des Beitrags der obigen Instantonkonfigurationen zur Energieaufspaltung zwischen den Grundzuständen mit $\vec{e} = (0, 0, 0)$ und $\vec{e} = (1, 1, 1)$, der die Form haben sollte:

$$\Delta E = A g_r^{-n} \exp(-S/g_r^2), \quad (2-66)$$

wobei $S = 4\pi^2$, g_r die renormierte Kopplung und $n \approx 7$ ist.

Für groß l_t ist der *mass gap* durch die Energie Fadenspannung gegeben, die man aus dem Abfallverhalten in euklidischer Zeit von Korrelationsfunktionen von räumlichen Polyakov-Loops misst. In diesem Längenbereich sollte sich die entsprechende Energie verhalten wie $|\vec{e}| \kappa l_s$, wobei κ die Fadenspannung ist. Dieses Verhalten zeigt sich in Monte-Carlo-Rechnungen ab ungefähr $z_\kappa = 3$ [49].

2.1.3 C-periodische Randbedingungen

Eine Konsequenz *periodischer* Randbedingungen ist die Tatsache, daß aufgrund des Gesetzes von Gauss ein periodisches System notwendigerweise immer neutral sein muß, da auf dem Torus die Flußlinien, die von einem geladenen Teilchen ausgehen, nicht ins Unendliche gehen können und somit an einem Teilchen mit der entgegengesetzten Ladung enden müssen. Eine mehr formale Begründung liefert das Gauss'sche Gesetz für Räume ohne Begrenzung bzw. Rand. In abelschen Theorien kann man das Problem durch antiperiodische Randbedingungen vermeiden, da dann die Flußlinien, die von einer Ladung ausgehen, am ladungskonjugierten Bild der Ladung auf

der anderen "Seite" enden können. Da nicht-abelsche Felder selber Ladung tragen, sind die natürliche Verallgemeinerung für diesen Fall die sog. C-periodischen Randbedingungen

$$A_k(\vec{x} + L\hat{e}_i) = \Omega_i(\vec{x})[\vec{\nabla} + A_k^*(\vec{x})]\Omega_i^{-1}(\vec{x}), \quad (2-67)$$

mit $A_k = A_k^a t^a$ und $(t^a)^\dagger = -t^a$. (* bedeutet komplex konjugiert.) Diese Randbedingungen identifizieren das Feld an der Stelle $\vec{x} + L\hat{e}_i$ mit dem ladungskonjugierten an der Stelle \vec{x} . Dies führt dazu, daß sich eichinvariante Operatoren mit der C-Parität $C = +1$ periodisch und die mit $C = -1$ antiperiodisch verhalten. Die Ω_i -Funktionen sind die sog. *twists* – siehe auch (2-67) – mit deren Hilfe man bei (anti-)periodischen Randbedingungen magnetischen Fluß einführen kann [59, 45]. Unter lokalen Eichtransformationen gilt

$$[g]A_k(\vec{x}) = g(\vec{x})[i\partial_k + A_k(\vec{x})]g^{-1}(\vec{x}), \quad (2-68)$$

und

$$[g]\Omega_i(\vec{x}) = g(\vec{x} + L\hat{e}_i)\Omega_i(\vec{x})g^T(\vec{x}), \quad (2-69)$$

wobei $g(\vec{x})$ eine $SU(N)$ -wertige Funktion mit beliebigen Randbedingungen ist. Da g eine unitäre Matrix ist, gilt $g^T = (g^{-1})^*$.

Im Fall $SU(2)$ gibt es allerdings eine Eichtransformation, die periodische Eichtransformationen in C-periodische transformiert

$$h = \exp\left(\frac{i\sigma_2}{2L} \sum_i x_i\right) \quad (2-70)$$

und umgekehrt, so daß eine Unterscheidung zwischen periodischen und c-periodischen Randbedingungen in diesem Fall sinnlos ist, da die Physik die gleiche ist. Eine Folge davon ist, daß aufgrund des Theorems von Bott für alle $SU(N)$ -Gruppen das Θ -Vakuum das gleiche ist wie mit periodischen Randbedingungen [44]. Andererseits sind die beiden Randbedingungen für $N \geq 2$ tatsächlich unterschiedlich. Dies wirkt sich insbesondere auf die mögliche Existenz von magnetischem und elektrischem Fluß aus. Aus der Kozyklus-Bedingung für die *twist*-Funktion Ω_i

$$\Omega_i(\vec{x} + L\hat{e}_i)\Omega_j^*(\vec{x}) = z_{ij}\Omega_j(\vec{x} + L\hat{e}_i)\Omega_i^*(\vec{x}), \quad (2-71)$$

(wobei für den *twist*-Tensor z , der über $z_{ij} = \exp(2\pi i\eta_{ij}/N)$ t'Hoofts magnetischen Fluß bestimmt, gilt $z_{ji} = z_{ij}^*$), folgt nach mehrfacher Anwendung in verschiedenen Richtungen, daß es keinen magnetischen Fluß im Sinne von t'Hooft gibt, wenn N ungerade ist, und dieser durch $Z_2^{d(d-1)/2}$ klassifiziert wird, wenn N gerade ist.

Auch die Möglichkeiten, elektrischen Fluß zu erzeugen, sind stark eingeschränkt. Für Eichtransformationen, die nur bis auf ein Element des Zentrums der Gruppe periodisch sind, gilt unter C-periodischen Randbedingungen:

$$h_{\vec{z}}(\vec{x} + L\hat{e}_i) = z_i h_{\vec{z}}^*(\vec{x}), \quad (2-72)$$

wobei $z_i = \exp(2\pi i k_i/N)$ die N -ten Einheitswurzeln sind, k_i den elektrischen Fluß charakterisierte und $h_{\vec{z}}$ in (1.15) mit $h_{\vec{k}}$ bezeichnet wurde. Vergleicht man nun

$$h_{\vec{z}}(\vec{x} + L\hat{e}_i + L\hat{e}_j) = z_i z_j^* h_{\vec{z}}(\vec{x}) \quad (2-73)$$

mit

$$h_{\vec{z}}(\vec{x} + L\hat{e}_j + L\hat{e}_i) = z_j z_i^* h_{\vec{z}}(\vec{x}), \quad (2-74)$$

dann ist das nur konsistent, wenn gilt

$$z_i^2 = z_j^2. \quad (2-75)$$

Also müssen alle z_i gleich sein, wenn N ungerade ist, oder gleich sein bis auf ein Vorzeichen, wenn N gerade ist (für N größer 2). Wenn man Darstellungen dieser Eichtransformationen auf dem Hilbert-Raum diskutiert, sieht man, daß für den hier am meisten interessierenden Fall $SU(3)$ keine Sektoren mit elektrischem Fluß existieren. Diese Tatsache gab Anlaß zu der Hoffnung, daß ein Übergang zum Limes unendlich großen Volumens mit den C -periodischen Randbedingungen einfacher zu vollziehen sei. Es zeigte sich aber, daß der effektive Hamilton trotzdem eine komplizierte Vakuumstruktur hat, die von den restlichen Symmetrien, die im folgenden gezeigt werden, bestimmt wird.

Da nun für $SU(3)$ alle Übergangsfunktionen Ω_i physikalisch äquivalent sind, kann man $\Omega_i = 1$ wählen. Damit wird 2-67

$$\begin{aligned} A_k^A(\vec{x} + L\hat{e}_i) &= A_k^A(\vec{x}), \quad A \in \{2, 5, 7\} \\ A_k^a(\vec{x} + L\hat{e}_i) &= -A_k^a(\vec{x}), \quad a \in \{1, 3, 4, 6, 8\}. \end{aligned} \quad (2-76)$$

Der Hamiltonoperator läßt sich dann entsprechend in $H = H^+ + H^-$ aufteilen:

$$\begin{aligned} H^+ &= \int d^3x \left[\frac{1}{2} g_0^2 E_i^A E_i^A + \frac{1}{4} g_0^{-2} F_{ij}^A F_{ij}^A \right] \\ H^- &= \int d^3x \left[\frac{1}{2} g_0^2 E_i^a E_i^a + \frac{1}{4} g_0^{-2} F_{ij}^a F_{ij}^a \right], \end{aligned} \quad (2-77)$$

wobei die Großbuchstabenindizes Größen bezeichnen, die aus den periodischen Eichfeldkomponenten gebildet werden, während die kleinen Buchstaben als Indizes für die antiperiodischen Komponenten reserviert sind. Die klassischen Minima dieses effektiven Hamilton sind gegeben durch $A_k^a = 0$, da die antiperiodischen Felder nicht räumlich konstant sein können, d. h. $\nabla_i A_j^a \neq 0$, was dazu führt, daß $F_{ij}^a \neq 0$ ist und die Forderung, daß F_{ij}^A verschwindet. Dies kann bei periodischen Feldern erreicht werden durch die Wahl der räumlich konstanten und abelschen Feldkomponenten in der Unter algebra mit $A \in \{2, 5, 7\}$. Man wählt

$$L A_k^A = \delta^{A2} C_k. \quad (2-78)$$

Wie im $SU(2)$ -Fall gibt es Eichsymmetrien, die bestimmte C_k miteinander identifizieren:

$$\exp(-4\pi t^2 x_i / L) : C_k \rightarrow C_k + 4\pi. \quad (2-79)$$

Außerdem gilt mit $\vec{l} = (1, 1, 1)$:

$$\exp(-3\pi t^2 \vec{x} \cdot \vec{l} / L) \exp(2\pi t^2 x_i / L) \exp(-\pi t^2 \vec{x} \cdot \vec{l} / L) : \vec{C} \rightarrow \vec{C} + 2\pi \vec{l}. \quad (2-80)$$

Weiterhin gibt es noch die diskrete Symmetrie:

$$\exp(-4\pi t^5 x_i / L) : \vec{C} \rightarrow -\vec{C}. \quad (2-81)$$

Die singulären Punkte des Vakuumtals befinden sich also bei $C_i = 0, (\pi, \pi, \pi), (\pi, \pi, -\pi), (\pi, -\pi, \pi), (\pi, -\pi, -\pi)$. Nachdem man nun die Konfigurationen identifiziert hat, die die potentielle Energie minimieren - die sog. Toronen-, kann man nun wieder so vorgehen, wie es Lüscher im Fall periodischer Randbedingungen getan hat, nämlich alle anderen Moden neben den Toronen auszuintegrieren, um ein effektives Potential zu erhalten. Dessen Minima, auch Quantenvakua

genannt, dienen dann als Startpunkte für eine störungstheoretische Entwicklung. Wie im Fall periodischer Randbedingungen stellt sich auch im Fall C-periodischer Randbedingungen heraus, daß es neben den Toronen Moden gibt, die an den Minima des effektiven Potentials quartisch sind. Diese können also nicht perturbativ ausintegriert werden, und die Dynamik in kleinen Volumina wird durch einen effektiven Hamilton für die quartischen Moden und die Toronen beschrieben.

Das effektive Potential

$$\mathcal{V}_{eff}(C) = \mathcal{V}_1\left(\frac{1}{2}C\right) + \mathcal{V}_1(C - \pi\vec{l}) + \mathcal{V}_1\left(\frac{1}{2}C - \pi\vec{l}\right), \quad (2-82)$$

mit

$$\mathcal{V}_1(C) = -\frac{d-1}{L\pi^2} \sum_{\vec{n}} \frac{1}{|\vec{n}|} \cos\left(\frac{1}{2}\vec{C} \cdot \vec{n}\right). \quad (2-83)$$

Das effektive Potential hat Minima bei $\vec{C} = 0$ und an den oben erwähnten, 2^{d-1} speziellen Punkten, die kollektiv als Menge Π zusammengefaßt werden. Um zu entscheiden, an welchem Punkt sich das absolute Minimum befindet, muß man die Summe ausführen. Für $d = 3$ erhält man

$$\begin{aligned} L\mathcal{V}_{eff}(0) &= -1.78447... \\ L\mathcal{V}_{eff}(\vec{C} \in \Pi) &= -3.25229... \end{aligned} \quad (2-84)$$

Es gibt also vier entartete, absolute Minima bei $\vec{C} \in \Pi$ und ein lokales Minimum bei $\vec{C} = 0$.

Der effektive Hamilton-Operator

Jedes der vier Minima kann als Startpunkt für eine perturbative Berechnung eines effektiven Hamilton-Operators für alle quartischen Moden dienen. Um nicht um den Punkt $\vec{C} = (\pi, \pi, \pi)$ entwickeln zu müssen, führten Kronfeld und Wiese eine Eichtransformation mit nichttrivialen *twist* durch mit

$$h(\vec{x}) = \exp(-\pi t^2 \vec{x} \cdot \vec{l}/L). \quad (2-85)$$

Das transformierte Eichfeld gehorcht der neuen Randbedingung

$$A_k(\vec{x} + L\hat{e}_i) = \Omega_i(\vec{x}) A_k^*(\vec{x}) \Omega_i^{-1}(\vec{x}). \quad (2-86)$$

Die Toronen sind wieder reelle, konstante, abelsche Felder.

Wenn man die obigen Betrachtungen wiederholt, sieht man, daß ein absolutes Minimum nun bei $\vec{C} = 0$ liegt, während die anderen bei $2\pi\hat{e}_i$ liegen. Die quartischen Moden an der Stelle $\vec{C} = 0$ sind die konstanten Moden von A_i^1 und A_i^3 . Für diese drei Moden erhält man einen effektiven Hamilton á la Lüscher:

$$LH_{eff} = g^{2/3}(1 + g^2 a_2) \left(\frac{1}{2} e_i^A e_i^A + \frac{1}{4} F_{ij}^A F_{ij}^A \right) + g^{4/3} m_{ij} c_i^A c_j^A g^{8/3} S_{ijkl}^{ABDE} c_i^A c_j^B c_k^D c_l^E, \quad (2-87)$$

wobei g wieder die im *minimal subtraction*-Schema renormierte Kopplung bei der Skala $1/L$ ist. Die numerischen Werte der Koeffizienten sind in [45] aufgelistet.

2.2 Sphärisches Volumen

2.2.1 Einbeziehung von Instantonen

Nachdem die Effekte der Torustopologie bzw. der zentralen Konjugationen auf die Vakuumstruktur im Prinzip verstanden sind, würde man nun natürlich gern den Einfluß der Vakua mit nichtverschwindendem Pontryagin-Index (2-7) auf ähnliche Weise berücksichtigen. Deren Existenz kompliziert die Vakuumstruktur der Eichtheorie und bedingt die Einführung des sog. Thetawinkels in die Theorie, der das Tunneln zwischen den verschiedenen Vakua analog zur Bildung von Blochwellen im periodischen Potential von Festkörpern beschreibt. Ein Tunneleignis zwischen zwei Vakua mit verschiedenem Pontryagin-Index erfolgt über die sog. Instantonfeldkonfiguration, deren analytische Form auf der Dreisphäre bekannt ist – während auf dem Torus nur numerische Lösungen erhalten wurden. (Dies ist der Hauptgrund, weshalb van den Heuvel und van Baal dazu übergingen, den Einfluß des Thetawinkels auf das *glueball*-Spektrum auf der Dreisphäre zu untersuchen.) [60, 61] Wieder wird angenommen, daß in kleinen Volumina die asymptotische Freiheit dazu führt, daß die Kopplungskonstante klein ist und die Störungstheorie anwendbar ist. Darum ist auch die Einschränkung der Eichfelder auf eine sog. fundamentale Domäne (die ein konvexer Unterraum aller Eichfeldkonfigurationen ist, die – modulo konstanter Eichtransformationen – in eins zu eins Korrespondenz mit dem Raum der Eichorbits stehen,) durch Anwendung der Coulombbeziehung zulässig [62]. Mit größer werdendem Volumen wird das Wellenfunktional sich im Konfigurationsraum weiter in die Richtungen ausbreiten, wo die potentielle Energie am kleinsten ist, d. h. in die Richtung der Moden des Eichfelds mit der kleinsten Energie. Irgendwann wird das Wellenfunktional auch im Bereich der Instantonenbarriere, die zwischen den Eichkopien des Vakuums mit verschiedenem Pontryagin-Index liegt, einen nicht mehr zu vernachlässigenden Wert annehmen. Wieder nimmt man an, daß sich das Eichfeld in orthogonale Moden aufspalten läßt, so daß man die Dynamik eines Systems mit unendlich vielen Freiheitsgraden auf ein quantenmechanisches System mit endlich vielen Freiheitsgraden beschränken kann, indem man für die Moden hoher Energie harmonische Oszillator-Wellenfunktionen annimmt und einen effektiven Hamilton-Operator für die Niederenergiemoden konstruiert. Diese Niederenergiemoden sollten zuerst auf die Grenze der fundamentalen Domäne stoßen, wenn sich das Wellenfunktional mit wachsendem Volumen im Konfigurationsraum ausbreitet. Nichtperturbative Effekte sollten sich wieder dadurch zeigen, daß man für das Wellenfunktional bzw. die Wellenfunktion für die Niederenergiemoden Randbedingungen an der Grenze der fundamentalen Domäne formulieren muß, die vom Thetawinkel abhängen werden.

An dieser Stelle kann natürlich nur eine kurze Zusammenfassung der technisch sehr anspruchsvollen Rechnungen [63, 64, 65] gegeben werden, zumal das Hauptinteresse der Dissertation den Problemen, die mit der Torustopologie zusammenhängen, gilt. Die Dreisphäre S^3 wird in R^4 eingebettet und durch den Einheitsvektor n_μ parametrisiert ($n_\mu n_\mu = 1$). Der Radius R der Dreikugel wird zunächst gleich Eins gesetzt. Die R -Abhängigkeit kann durch Dimensionsanalyse leicht wieder rekonstruiert werden. Man führt die Einheitsquaternionen σ_μ und ihre konjugierten $\bar{\sigma}_\mu$ (wobei $\bar{\sigma}_\mu = \sigma_\mu^+$),

$$\sigma_\mu = (id, i\tau), \quad \bar{\sigma}_\mu = (id, -i\tau), \quad (2-88)$$

für die folgende Multiplikationsregeln gelten

$$\sigma_\mu \bar{\sigma}_\nu = \eta_{\mu\nu}^\alpha \sigma_\alpha, \quad \bar{\sigma}_\mu \sigma_\nu = \bar{\eta}_{\mu\nu}^\alpha \sigma_\alpha, \quad (2-89)$$

wobei 't Hoofts η -Symbole generalisiert wurden, indem man eine in μ und ν symmetrische Komponente für $\alpha = 0$ einführte. Mit diesen η bzw. $\bar{\eta}$ kann man nun orthonormale Koordinatensysteme auf S^3 errichten, indem man in den folgenden Gleichungen den Viererindex α auf einen Dreierindex a einschränkt:

$$e_\mu^\alpha = \eta_{\mu\nu}^\alpha n_\nu, \quad \bar{e}_\mu^\alpha = \bar{\eta}_{\mu\nu}^\alpha n_\nu. \quad (2-90)$$

(Für $\alpha = 0$ erhält man die Normale auf S^3 .) Die Motivation für diese Wahl des Koordinatensystems liegt in der Tatsache begründet, daß die Instanton-Vektorpotentiale nun eine besonders einfache Form annehmen. Die Vektorpotentiale auf S^3 können nun in einem der beiden Systeme beschrieben werden, z. B. :

$$A_i e_\mu^i = A_i^a e_\mu^i \sigma^a / 2. \quad (2-91)$$

Wie bei der Behandlung der Eichtheorie auf dem Torus ist es auch hier wieder das Ziel, die Moden mit der niedrigsten Energie zu isolieren, da man hofft, daß nichtstörungstheoretische Effekte sich bevorzugt nur in dieser kleinen Anzahl von Feldmoden bemerkbar machen werden. Der 18-dimensionale Unterraum $A(c, d)$ mit

$$A_{c,d} = (c_i^a e_\mu^i + d_j^a \bar{e}_\mu^j) t^a \quad (2-92)$$

ist der Eigenraum des quadratischen Fluktuationsoperators \mathcal{M}

$$\mathcal{V}(A) = - \int_{S^3} \frac{1}{2} \text{tr}(F_{ij} F_{ij}) = \int_{S^3} \text{tr}(A_i \mathcal{M}_{ij} A_j) + O(A^3) \quad (2-93)$$

mit dem Eigenwert 4. (Der nächste Eigenwert ist 9.) Dieser Unterraum enthält Eichkopien des $A_i^a = 0$ Vakuums und die Tunnelpfade zwischen diesen Vakua. Zum Beispiel ist das Vakuum $A^a = -\sigma^a$, d. h. in c - und d -Parametrisierung $c_i^a = -2\delta_i^a$, $d_i^a = 0$, eine Eichkopie von $A_i^a = 0$ unter der Eichtransformation $g = n \cdot \bar{\sigma}$ mit Windungszahl eins. Der Tunnelpfad wird durch $c_i^a = -u\delta_i^a$, $d_i^a = 0$ parametrisiert. Dabei läuft u von 0 bis 2. Für $u = 1$ geht der Tunnelpfad durch eine Eichfeldkonfiguration, die auf einem Sattelpunkt der Energiehyperfläche liegt und als Sphäleron bezeichnet wird. Das Vakuum $c_i^a = 0$, $d_i^a = -2\delta_i^a$ ist eine Eichkopie von $A_i^a = 0$ unter der Eichtransformation $g = n \cdot \sigma$. Der entsprechende Sattelpunkt wird als Anti-Sphäleron bezeichnet und ist wiederum eine Eichkopie des Sphäleron unter der eben erwähnten Eichtransformation. Der Hamiltonian in niedrigster Ordnung für die oben diskutierten 18 Moden ist:

$$RH(c, d) = - \frac{g(R)^2}{4\pi^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial c_i^a \partial c_i^a} + \frac{\partial^2}{\partial d_i^a \partial d_i^a} \right) + \frac{2\pi^2}{g(R)^2} \mathcal{V}_{cl}(c, d). \quad (2-94)$$

Dabei ist $g(R)$ die renormierte Kopplungskonstante, und der Kugelradius R wurde diesmal nicht gleich eins gesetzt. Das Potential für diese Moden ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{cl}(c, d) &= - \int_{S^3} \frac{1}{2} \text{tr}(F_{ij} F_{ij}) = \mathcal{V}_{cl}(c) + \mathcal{V}_{cl}(d) + \frac{1}{3} \{ (c_i^a c_i^a)(d_j^b d_j^b) - (c_i^a d_j^a)(c_i^b d_j^b) \} \\ &= \mathcal{V}_{cl}(c) + \mathcal{V}_{cl}(d) + \frac{1}{3} (\text{tr}(X)\text{tr}(Y) - \text{tr}(XY)), \end{aligned} \quad (2-95)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{cl}(c) &= \{ 2(c_i^a c_i^a) + 6 \det c + \frac{1}{4} [(c_i^a c_i^a)(d_j^b d_j^b) - (c_i^a d_j^a)(c_i^b d_j^b)] \} \\ &= 2\text{tr}(X) + 6 \det c + \frac{1}{4} (\text{tr}(X)^2 - \text{tr}(X^2)). \end{aligned} \quad (2-96)$$

Dabei ist $X = cc^T$ und $Y = dd^T$.

Das Spektrum des Hamiltonian wird wieder durch eine Variationsrechnung bestimmt. Man führt wieder (diesmal zwei) sowohl radiale Koordinaten $r_c = \sqrt{c_i^a c_i^a}$ und $r_d = \sqrt{d_i^a d_i^a}$ als auch Winkelkoordinaten \hat{c}_i^a und \hat{d}_i^a ein und formuliert die Randbedingungen entsprechend in r_c und r_d . Das Sphäron hat die Radialkoordinaten $(\sqrt{3}, 0)$ und Winkelkoordinaten $\hat{c}_i^a = -\delta_i^a$ mit $\hat{c}_i^a = c_i^a/r_c$. Es ist mit dem Sphäron bei $(0, \sqrt{3})$ durch eine Eichtransformation verbunden. Man betrachtet nur den Bereich $r_c < \sqrt{3}$ und $r_d < \sqrt{3}$ und berücksichtigt den vollen Konfigurationsbereich, indem man Randbedingungen für die Wellenfunktionen der Form $\phi(r_c, r_d)Y(\hat{c}, \hat{d})$ an dessen Grenzen stellt. Eigentlich ist die Grenze des fundamentalen Bereichs des vollen (c,d)-Bereichs nicht bekannt, aber in dem hier betrachteten Energiebereich sind die Randbedingungen nur an den Punkten wichtig, wo die potentielle Energie niedrig ist, d. h. an den Sphäronkonfigurationen. An den anderen Punkten wird die potentielle Energie viel höher sein als die Energie der Wellenfunktion. Das bedeutet, daß die Wellenfunktion in diesen Bereichen exponentiell abfällt und daß die Randbedingungen keinen großen Einfluß auf das Spektrum haben sollten. In der gleichen Weise kann man argumentieren, daß die genaue Lage der Grenze abseits der Sphäronkonfiguration ebenso wenig wichtig ist, und man dem entsprechend eine gewisse Wahlfreiheit hat, um sich handhabbare Randbedingungen zu wählen. Für die Sphäronkonfigurationen sind die Randbedingungen aber genau festgelegt. Da die beiden Sphärons durch eine Eichtransformation mit der Windungszahl eins miteinander verknüpft sind, gilt die Randbedingung:

$$\Psi(A(Sph, 0)) = e^{i\Theta} \Psi(A(0, Sph)) . \quad (2-97)$$

Auf diese Weise kommt der Thetawinkel ins Spiel.

Die Gesamtwellenfunktion wird nun wieder zerlegt

$$\Psi = \frac{1}{r_c^4 r_d^4} \sum_n \psi^{(n)}(c, d) \chi_{[c,d]}^{(n)}(q) , \quad (2-98)$$

wobei q alle Moden orthogonal zu den c- und d-Moden bezeichnet. Die Funktionen $\chi_{[c,d]}^{(n)}(q)$ sind wieder perturbative Eigenfunktionen des transversalen Hamiltonian. In der adiabatischen Näherung werden die transversalen Wellenfunktionen χ wieder im Grundzustand befindlich angenommen, der von den angeregten Zuständen dynamisch entkoppelt sein soll. Damit ergibt sich für $\psi = \psi^{(0)}$ ein effektiver Hamiltonian

$$H = -\frac{g(R)^2}{4\pi^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_c^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_d^2} \right) - 12 \left(\frac{1}{r_c^2} + \frac{1}{r_d^2} \right) + \left(\frac{1}{r_c^2} \Delta_{\hat{c}} + \frac{1}{r_d^2} \Delta_{\hat{d}} \right) + \frac{1}{g(R)^2} \mathcal{V}(c, d) . \quad (2-99)$$

Die Randbedingungen übersetzen sich in

$$\psi(A(sph, 0)) = e^{i\Theta} \psi(A(0, Sph)) . \quad (2-100)$$

Für die Ergebnisse der Rechnung sei auf die Originalarbeit verwiesen. Solange die Kopplungskonstante klein ist, sieht man praktisch keine Abhängigkeit der Massen von Θ . Für ein Volumen von 1 Kubikfermi ergibt sich wieder ein Massenverhältnis von Spin 2^+ zu Spin 0^+ von ca. 1.5.

Die Einbeziehung von Quantenfluktuationen um die klassischen Lösungen in Ein-Schleifen-Näherung ergibt wieder Korrekturen zum klassischen Hamiltonian bzw. effektiven Potential [66]:

$$\mathcal{V}_{eff} = \frac{2\pi^2}{g_R^2} \mathcal{V}_{cl}(c, d) + \mathcal{V}_{eff}^{(1)} , \quad (2-101)$$

mit

$$\mathcal{V}^{(1)}(c, d) = \mathcal{V}^{(1)}(c) + \mathcal{V}^{(1)}(d) + \kappa_7 \text{tr}(X) \text{tr}(Y) + \kappa_8 \text{tr}(XY) \quad (2-102)$$

und

$$\mathcal{V}^{(1)}(c) = \kappa_1 \text{tr}(X) + \kappa_2 \det c + \kappa_3 \text{tr}(X)^2 + \kappa_4 \text{tr}(X^2) + \kappa_5 \det(c) \text{tr}(X) + \kappa_6 \text{tr}(X)^3 \quad (2-103)$$

$$\frac{1}{g_R^2} = \frac{1}{g_0^2} + \frac{11}{12\pi^2\epsilon} + \frac{11}{12\pi^2\epsilon} \log\left(\frac{L}{2\sqrt{\pi}}\right) + \kappa_0 \quad (2-104)$$

Eine Wiederholung der Variationsrechnung für diesen neuen effektiven Hamiltonoperator ergibt keine qualitative Veränderung des Spektrums [60, 67, 68].

2.2.2 Cavity QCD

Eine andere Methode, mit der versucht wird, die Eigenschaften der Hadronen zu beschreiben, ist die sog. Hohlraum-QCD [69] (und Literatur darin). Die Randbedingungen sind nicht mehr periodisch, sondern müssen am Rand der Kugel so gewählt werden, daß sie mit der Eichsymmetrie und den Feldgleichungen verträglich sind. Dies geschieht zur Zeit noch etwas willkürlich und *ad hoc*, um das *confinement* zu simulieren, das ja eigentlich aus der Dynamik der QCD folgen sollte. Die Rechnungen werden auch nur störungstheoretisch durchgeführt und sind schwierig, da die Tatsache, daß man die Teilchen in einer statischen Kugel einschließt, die Translations- und Lorentzinvarianz der zugrunde liegenden Eichtheorie bricht, und es schwer ist, diese Symmetrien wieder konsistent herzustellen, ohne die Dynamik der Grenze explizit einzuführen. Außerdem wird die chirale Symmetrie gebrochen, und es ist schwierig, diese durch Kopplung an ein elementares Pionfeld wiederherzustellen. Feynman-Diagramme höherer Ordnung sind schwierig zu berechnen, insbesondere wenn sie divergieren, da die Singularitäten numerisch abgespalten werden müssen. Allerdings hilft wieder die Tatsache, daß die Feldoperatoren in Hohlraummoden entwickelt werden, anstatt in ebenen Wellen, so daß die Infrarotprobleme, die bei unendlichem Volumen auftreten, entfallen. Trotz jahrelanger Arbeit von Viollier und Mitarbeitern ist nicht klar, ob die perturbative *cavity*-QCD besser konvergiert als die QCD in unendlichem Volumen. Die bisher berechneten Korrekturen höherer Ordnung haben nicht zu einer Annäherung zwischen Rechnung und Experiment geführt, sondern führen eher davon weg [69].

2.3 Andere Systeme

2.3.1 QCD in 1+1 Dimensionen

Ähnliche Phänomene wie auf dem Torus mit periodischen Randbedingungen ergeben sich auch, wenn man QCD in 1+1 Dimensionen mit periodischen Randbedingungen betrachtet [70]. In Coulomb-Eichung hat man nur ein Eichfeld $A = A^a t^a$. Für SU(2) ist dessen Vakuumtal einfach $A = C\sigma_3$. Ein effektiver Hamiltonoperator für C ist sehr einfach und liefert auch eine einfache Dynamic für C [71].

2.3.2 Thermodynamik von Eichfeldtheorien

Da man die quantenstatistische Zustandssumme von Eichfeldtheorien als Pfadintegral in imaginärer Zeit τ , die wegen der Spur in der Zustandssumme periodisch sein muß, schreiben kann, treten für die A_0 -Komponente des Feldes die gleichen Phänomene auf, wie für die räumlichen Komponenten im Fall periodischer Randbedingungen im Raum. Wenn die Temperatur $1/\beta$ (Boltzmannkonstante gleich 1 gesetzt) sehr hoch ist, wird die kompaktifizierte imaginäre Zeit sehr klein. Man kann dann wieder versuchen, die Störungstheorie anzuwenden und für die A_i -Eichfeldkomponenten durch Ausintegration der A_0 -Nicht-Null-Moden ein effektives Potential zu erhalten [72, 73, 74, 75, 76, 77, 78]. Auch hier stellt sich dann wieder das Problem der Vakuumentartung.

Kapitel 3

Die Monte Carlo Methode

Obwohl die folgenden Punkte den Praktikern wohl bekannt sind, soll in diesem Kapitel ein kurzer Überblick über die verschiedenen Monte-Carlo-Methoden und beispielhaft einige ihrer Anwendungen gegeben werden, um die Diskussion in Kapitel drei und vier nicht mit technischen Details zu belasten. Die Auswahl der Beispiele ist natürlich stark von den Interessen des Autors geprägt.

3.1 Variationsmethoden

Die bei weitem wichtigsten Methoden zur genäherten Lösung der Schrödingergleichung basieren auf dem Variationsprinzip [79]. Deshalb seien die allgemeinen Prinzipien hier nur kurz zusammengefaßt:

1.) Sei E_0 die exakte Energie des Grundzustands des Systems, d. h. der tiefste Eigenwert des Hamilton-Operators \mathbf{H} , und sei ϕ eine beliebige Wellenfunktion, so gilt die Ungleichung

$$\langle \mathbf{H} \rangle_{\phi} = \frac{(\phi, \mathbf{H}\phi)}{(\phi, \phi)} \geq E_0 . \quad (3-1)$$

Der mit ϕ berechnete Erwartungswert von \mathbf{H} ist eine obere Schranke für den exakten Energie-Eigenwert E_0 .

2.) Gegeben sei die Variationsaufgabe, $\langle \mathbf{H} \rangle_{\phi}$ in Abhängigkeit von ϕ stationär zu machen, d. h. es sei dasjenige ϕ gesucht, für das gilt

$$\delta \langle \mathbf{H} \rangle_{\phi} = 0 \quad (3-2)$$

für beliebige (infinitesimale) Variationen von ϕ . Die Lösung dieser Aufgabe ist dann gleichbedeutend mit derjenigen, die Eigenfunktionen der Schrödingergleichung

$$\mathbf{H}\psi_i = E_i\psi_i \quad (3-3)$$

zu suchen. Genau die der obigen Gleichung genügenden ψ_i machen $\langle \mathbf{H} \rangle_{\phi}$ stationär und umgekehrt. Insbesondere ist diejenige Funktion ϕ , die $\langle \mathbf{H} \rangle_{\phi}$ zu einem Minimum macht, identisch mit der zum tiefsten Eigenwert E_0 gehörenden Eigenfunktion ψ_0 .

3.) Die Differenz zwischen E_0 und $\langle \mathbf{H} \rangle_\phi$ ist ein Maß für die Güte der Näherungsfunktion ϕ . Qualitativ gesagt, ist ϕ eine um so bessere Näherung für ψ_0 , je kleiner $|E_0 - \langle \mathbf{H} \rangle_\phi|$ ist, d. h. je dichter $\langle \mathbf{H} \rangle_\phi$ an E_0 liegt. Quantitativ wird dies durch die sog. Eckartsche Ungleichung ausgedrückt:

$$1 - |(\phi, \psi_0)|^2 \leq \frac{\langle \mathbf{H} \rangle_\phi - E_0}{E_1 - E_0}, \quad (3-4)$$

wobei E_1 die (exakte) Energie des ersten angeregten Zustands bedeutet.

Je kleiner man die rechte Seite der obigen Gleichung macht, umso kleiner wird in der Regel auch die linke Seite sein. Da in der obigen Formel aber die rechte Seite nicht gleich der linken Seite, sondern nur eine obere Schranke für diese ist, kann es durchaus auch vorkommen, daß für zwei Näherungsfunktionen ϕ_1 und ϕ_2 bei der einen die rechte, bei der anderen die linke Seite kleiner ist als bei der anderen. Mit anderen Worten: "bessere Energie" bedeutet nicht notwendigerweise auch "bessere Wellenfunktion".

Das Raleigh-Ritz Verfahren

Man setzt die Variationsfunktion ϕ als eine *endliche* Linearkombination gegebener Basisfunktionen χ_i an

$$\phi = \sum_{k=1}^n c_k \chi_k \quad (3-5)$$

und betrachtet die Koeffizienten c_k als die Variationsparameter. Für $\langle \mathbf{H} \rangle_\phi$ ergibt sich

$$\langle \mathbf{H} \rangle_\phi = \frac{\sum_{i,k} c_i^* c_k \langle \chi_i, \mathbf{H} \chi_k \rangle}{\sum_{i,k} c_i^* c_k \langle \chi_i, \chi_k \rangle} = \frac{A}{B}, \quad (3-6)$$

wobei A und B nur Abkürzungen für den Nenner und den Zähler sind. Man differenziert jetzt $\langle \mathbf{H} \rangle_\phi$ nach einem herausgegriffenen Koeffizienten c_l , und setzt die Ableitung gleich Null. (Der Einfachheit halber betrachtet man im folgenden nur den Fall reeller Basisfunktionen und Koeffizienten, d. h. $c_i^* = c_i$.)

$$\frac{\partial \langle \mathbf{H} \rangle_\phi}{\partial c_l} = \frac{1}{B^2} \left\{ B \frac{\partial A}{\partial c_l} - A \frac{\partial B}{\partial c_l} \right\} = 0 \quad (3-7)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial c_l} &= \sum_{i(\neq l)} c_i \langle \chi_i, \mathbf{H} \chi_l \rangle + \sum_{k(\neq l)} c_k \langle \chi_l, \mathbf{H} \chi_k \rangle + 2c_l \langle \chi_l, \mathbf{H} \chi_l \rangle \\ &= 2 \sum_k c_k \langle \chi_l, \mathbf{H} \chi_k \rangle = 2 \sum_k c_k \mathbf{H}_{lk} \end{aligned} \quad (3-8)$$

$$\frac{\partial B}{\partial c_l} = 2 \sum_k c_k \langle \chi_l, \chi_k \rangle = 2 \sum_k c_k S_{lk}. \quad (3-9)$$

Nach ein paar einfachen Umformungen erhält man

$$\sum_k c_k \mathbf{H}_{lk} - \langle \mathbf{H} \rangle_\phi \sum_k c_k S_{lk} = 0 \quad (3-10)$$

oder

$$\sum_k \{ \mathbf{H}_{lk} - \langle \mathbf{H} \rangle_\phi S_{lk} \} c_k = 0. \quad (3-11)$$

Man beachte, daß im Gegensatz zum Fall des vollständigen Basissatzes hier die Summe endlich ist, und anstelle der exakten Energie E die genäherte Energie $\langle \mathbf{H} \rangle_\phi$ auftritt. Das Gleichungssystem, das ein verallgemeinertes Matrixeigenwertproblem darstellt, hat nur für bestimmte Werte von $\langle \mathbf{H} \rangle_\phi$ sogenannte nichttriviale Lösungen, und diese Werte sind jeweils obere Schranken für die n ersten Eigenwerte der Schrödingergleichung. Natürlich erhält man mit einer endlichen Basis nur eine Näherungslösung der Schrödingergleichung, aber man ist zumindest sicher, daß der tiefste Eigenwert des Matrixproblems über dem tiefsten Eigenwert der Schrödingergleichung liegt, wenn man im allgemeinen auch nicht weiß, wieviel darüber. Durch Vergrößerung der Basis kann man im Prinzip Energie und Wellenfunktion beliebig dicht an den Lösungen der Schrödingergleichung erhalten. Trotzdem muß man aus praktischen Gründen (Speicherbedarf der Matrizen im Computer) den Basissatz möglichst klein halten. Eine geschickte, d. h. dem Problem angepaßte, Wahl der Basis ist also oft entscheidend.

3.2 Das Variations-Monte-Carlo-Verfahren

Sei \mathbf{x} ein mehrdimensionaler Vektor mit einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(\mathbf{x})$. Im Fall eines quantenmechanischen Systems sind in \mathbf{x} alle Koordinaten zusammengefaßt. Zur numerischen Lösung einer Vielteilchen-Schrödingergleichung

$$H\Psi(\mathbf{x}) = E_0\Psi(\mathbf{x}) , \quad (3-12)$$

wobei H den Hamilton-Operator des Systems bezeichnet,

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i<j} \Phi(\mathbf{r}_{ij}), \quad \mathbf{r}_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \quad (3-13)$$

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} ,$$

\hbar das Plancksche Wirkungsquantum, $\Psi(\mathbf{x})$ die Wellenfunktion, E_0 die Grundzustandsenergie und $\Phi(\mathbf{r}_{ij})$ das Paarpotential zwischen Teilchen i und j , kann das Raleigh-Ritz'sche Variationsprinzip mit der Monte-Carlo-Methode gekoppelt werden. Wenn Ψ_T als Ansatz für die Wellenfunktion verwendet wird, ergibt sich für die Variationsenergie als dem Energieerwartungswert

$$E_{Var} := \frac{\int \Psi_T(\mathbf{x}) H \Psi_T(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int |\Psi_T(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}} \geq E_0 . \quad (3-14)$$

Das heißt, E_{Var} ist eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie. Für $\Psi_T = \Psi(\mathbf{x})$ ist $E_{Var} = E_0$. Um die Monte-Carlo-Methode zur Auswertung der Integrale verwenden zu können, ist die folgende Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion besonders nützlich:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{|\Psi_T(\mathbf{x})|^2}{\int |\Psi_T(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}} , \quad (3-15)$$

und die Variationsenergie wird geschrieben als

$$E_{Var} = \int f(\mathbf{x}) E(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \langle E(\mathbf{x}) \rangle \geq E_0 , \quad (3-16)$$

wobei $E(\mathbf{x})$ die sog. lokale Energie ist, definiert als

$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Psi_T(\mathbf{x})} H \Psi_T(\mathbf{x}) . \quad (3-17)$$

Um einen Schätzwert für E_{Var} zu erhalten, werden \mathbf{x} -Werte aus $f(\mathbf{x})$ ermittelt und der Durchschnitt der daraus resultierenden $E(\mathbf{x})$ gebildet. Für Systeme mit mehr als nur ein paar Teilchen kann die Ermittlung der \mathbf{x} -Werte nur mit dem Metropolis-Algorithmus oder ähnlichen durchgeführt werden. Die MC-Variationsmethode wurde angewendet auf das Problem flüssigen Heliums, Fremd-Moleküle in Helium- *clustern* [80], strukturelle Optimierung von Wassermolekülen [81], Strukturberechnungen von festem Wasserstoff, Diamant, Graphit, Silizium und Nickeloxid, und vielen anderen Problemen, in denen die Elektronenkorrelationen mit Hilfe der Jastrow-Wellenfunktionen beschrieben werden, deren analytische Integration zu schwierig ist [82, 83].

3.3 Greenfunktions- und Diffusions-Monte-Carlo

Die Pfadintegral- und Greenfunktionsmethode unterscheiden sich hauptsächlich darin, wie sie den Operator der kinetischen Energie T behandeln. Beim Pfadintegral Monte-Carlo wird T Teil des Potentials zwischen imaginären Replikateilchen, während im Greenfunktions-Monte-Carlo (GFMC) sein Beitrag gebraucht wird, um Diffusion bzw. einen *Random Walk* zu bewirken [84]. Eine einfache Form des GFMC ist das sog. Diffusions-Quanten-Monte-Carlo [85, 86, 87]. Wenn man die Schrödinger-Gleichung in imaginärer Zeit aufschreibt,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi , \quad (3-18)$$

sieht man, daß man die beiden Terme auf der rechten Seite der Gleichung als Diffusionsterm mit einer Diffusionskonstanten $D = \hbar^2/2m$ und einen Zerfalls- bzw. Wachstumsratenterm $-V\Psi$ betrachten kann.

Eine allgemeine Lösung der Schrödingergleichung hat die Form:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_i \phi_i(\mathbf{x}) e^{\frac{-iE_i t}{\hbar}} , \quad (3-19)$$

wobei \mathbf{x} ein $3N$ -dimensionaler Vektor ist, der die Koordinaten der N Teilchen darstellt, und ϕ_i und E_i die Eigenfunktionen bzw. Eigenwerte der zeitunabhängigen Schrödingergleichung sind. Man sieht, daß für imaginäre Zeiten die Summe oszillierender Terme zu einer Summe exponentiell abfallender Terme wird. Die imaginäre Zeit wirkt auf diese Weise als ein Projektor, der für große Zeiten den Zustand niedrigster Energie herausprojiziert. Da man ein konstantes Potential zum Potentialterm der Schrödingergleichung addieren kann, ohne daß sich die Form der ϕ_i ändert, kann man den Nullpunkt der Energieskala auf E_0 verschieben, so daß der Grundzustand nicht zerfällt.

In imaginärer Zeit schreibt sich die Schrödingergleichung dann mit $\tau = it/\hbar$ und mit verschobener Energie:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = D \Delta \Psi - (V - E_0) \Psi = -H \Psi , \quad (3-20)$$

mit $H = T + (V - E_0)$. Im folgenden wird ein Einheitensystem verwendet, in dem \hbar , m und e gleich Eins sind. Statt τ wird wieder t als Bezeichnung für die - nun imaginäre - Zeit verwendet.

Die obige 'Diffusionsgleichung' hat eine formale Greensfunktion oder Operatorlösung der Form

$$\begin{aligned} G &= \exp(-tH), \text{ mit} \\ \Psi(t) &= G\Psi(0). \end{aligned} \quad (3-21)$$

G kann als die Wahrscheinlichkeit interpretiert werden, daß sich die Teilchenkonfiguration in der x-Darstellung in der Zeit t von \mathbf{x} nach \mathbf{x}' verändert:

$$G(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t) = \langle \mathbf{x}' | \exp[-tT - t(V - E_0)] | \mathbf{x} \rangle. \quad (3-22)$$

Da die Greenfunktionsmethode ziemlich kompliziert ist, wird im folgenden nur die Kurzzeitapproximation von G vorgestellt. In dieser Näherung nutzt man die Tatsache aus, daß exakte Lösungen für das Diffusions- und Zerfallsproblem bekannt sind, so daß eine explizite analytische Formel für G angegeben werden kann - allerdings nur in der Ordnung $O(\Delta t)$, da die Tatsache, daß V und T nichtkommutierende Operatoren sind, einen Fehler von höherer Ordnung in Δt hervorruft. Die resultierende Kurzzeitnäherung für G ist

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', \Delta t) &\cong \langle \mathbf{x}' | \exp(-\Delta t V/2) \exp(-\Delta t T) \exp(-\Delta t V/2) | \mathbf{x} \rangle \exp(+\Delta t E_0) \\ &= \exp(-(\Delta t/2)(V(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x})) + \Delta t E_0) \langle \mathbf{x}' | \exp(-\Delta t T) | \mathbf{x} \rangle \end{aligned} \quad (3-23)$$

$$\equiv w(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Delta t) G_D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', \Delta t), \quad (3-24)$$

wobei $w(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Delta t)$ die Zerfalls- bzw. Geburtsrate von Zufallsläufem ist und durch

$$w(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Delta t) = \exp(-(\Delta t/2)(V(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x})) + \Delta t E_0) \quad (3-25)$$

gegeben ist. Der Propagator G_D ist einfach die Lösung für die gewöhnliche Diffusionsgleichung :

$$G_D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', \Delta t) = (4\pi D\Delta t)^{-3N/2} e^{-(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2 / 4d\Delta t}. \quad (3-26)$$

Die Verwendung von Δt im Argument von G_D soll daran erinnern, daß die Darstellung von G nur für kleine Zeitintervalle gilt.

Der folgende Algorithmus liefert eine Lösung der Schrödingergleichung in imaginärer Zeit sowie eine Abschätzung für die Grundzustandsenergie und die entsprechende Eigenfunktion.

Man beginnt mit einer Menge von M Konfigurationen, d.h. M Vektoren \mathbf{x} im Konfigurationsraum der N Teilchen. Es ist vorteilhaft, mit Konfigurationen zu beginnen, in denen die Teilchen vornehmlich in Raumregionen positioniert sind, wo der Betrag der Wellenfunktion wahrscheinlich groß sein wird. Die Zahl M der Konfigurationen hängt natürlich von der Problemstellung und der gewünschten Genauigkeit ab. Üblich sind Werte im Bereich zwischen 100 und 1000. Jede dieser Anfangskonfigurationen hat die lokale Zeit $t = 0$.

1. Wähle eine der M Konfigurationen und verändere jede der Teilchenkoordinaten von \mathbf{x} zu \mathbf{x}' . Die Verschiebung wählt man aus einer Gauss-Verteilung mit der Breite $2D\Delta t$ und dem Mittelwert Null. Diese Veränderung der Koordinaten entspricht dem Diffusionsschritt. Der Zeitschritt muß natürlich so klein gewählt werden, daß die Kurzzeitnäherung gültig bleibt. Die lokale Zeit der neuen Konfiguration erhöht sich um Δt .

2. Gewichte die Konfiguration \mathbf{x}' mit $w(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Delta t)$, um die vollständige Greenfunktion G zu erhalten. Eine praktische Form der Gewichtung, die die Stichprobeneffizienz erhöht, ist die sog. Verzweigung(-smethode). Sie hat ihren Namen von der Tatsache, daß z.B. für den Fall $w \approx 2$ man 2 *walker* bei \mathbf{x}' erzeugt, wo vorher nur einer war. Beim nächsten *update*-Schritt werden die beiden *walker* im allgemeinen an verschiedene Orte gehen, da ihre Bewegungen zufällig sind. Die Spur des Zufallspfadens in der Zeit wird wie ein verzweigter Polymer aussehen, obwohl es

in diesem Fall kein Verbot der Überschneidung von Zufallspfaden gibt. Um die Verzweigung in jedem Fall korrekt durchzuführen, muß man eine ganzzahlige Menge von Kopien der Konfiguration machen, deren durchschnittliche Kopienzahl im statistischen Mittel der reellen Zahl w entspricht. Ein einfacher Weg, dies zu erreichen, liegt darin, den ganzzahligen Anteil von $w + \chi$ zu wählen, wobei χ eine gleichverteilte Zufallszahl im Intervall $0 \leq \chi < 1$ ist. Die Zahl der Kopien kann jede nichtnegative ganze Zahl einschließlich Null sein. Im letzten Fall wird der *Random Walk* für diese Konfiguration \mathbf{x}' abgebrochen. Jede der Kopien hat die gleiche lokale Zeit.

3. Man wiederholt den ersten Schritt für alle Mitglieder des Ensembles und generiert dadurch ein neues Ensemble zu einer späteren Zeit Δt mit einer unter Umständen verschiedenen Anzahl von 'Schnappschüssen' bzw. Konfigurationen. Eine Iteration angewandt auf das Ensemble ist äquivalent zur Durchführung der Integration

$$\Psi(\mathbf{x}', t) = \int d\mathbf{x} G(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', \Delta t) \Psi(\mathbf{x}, t - \Delta t) . \quad (3-27)$$

4. Unabhängig von der anfänglichen Konfiguration ist $\Psi(\mathbf{x}, t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung. Allerdings muß man die obige Integration solange iteriert werden, bis t so groß wird, daß man sich asymptotisch der Grundzustandsverteilung nähert. Dafür müssen die Schritte 1 bis 3 gewöhnlich mehrere tausendmal wiederholt werden. Gleichzeitig muß man E_0 so anpassen, daß die 'Grundzustandspopulation' nicht auf null Kopien zerfällt. Wenn dagegen E_0 zu klein ist, wird die Population der Konfigurationen wachsen. E_0 ist also so anzupassen, daß die Population asymptotisch stabil ist, dann kann man die Grundzustandsenergie abschätzen. Hingegen wird man gewöhnlich, um die Population stabil zu halten, E_0 schrittweise verändern, im allgemeinen nach ca. 100 Iterationen. Die generierten 'Schnappschüsse' sind Stichproben für die Rekonstruktion der Grundzustandswellenfunktion, sobald ein stationärer Zustand erreicht ist, d.h. E_0 um einen konstanten Wert fluktuiert.

Leider kann die obige Methode sehr ineffizient werden, insbesondere durch den Verzweigungsprozeß. Wenn das Potential stark negativ wird, wie im Fall des Coulombpotentials, wenn sich zwei ungleich geladene Teilchen zu nahe kommen, würde die Zahl der Kopien eines Zufallsläufers nahe der Singularität extrem anwachsen. Der nächste Zeitschritt der Simulation würde eine riesige Zahl von Zufallsläufern erfordern, und die Simulation würde sich extrem verlangsamen. Im allgemeinen kann dies verhindert werden, indem man schon bekannte Informationen in der Simulation berücksichtigt, z.B. eine ungefähre Kenntnis der Wellenfunktion [88, 89], d. h. man macht einen Ansatz für die Wellenfunktion Ψ_T . In dieser Methode stellt man die Schrödingergleichung in imaginärer Zeit für die Produktwellenfunktion $f = \Psi_T \Psi$ auf.

Das Ergebnis für f ist

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\Delta f - D\nabla(f\mathbf{F}(\mathbf{x})) + (E_0 - E_L(\mathbf{x}))f , \quad (3-28)$$

wobei $E_L = H\Psi_T/\Psi_T$ die 'lokale' Energie und $\mathbf{F} = 2\nabla \ln \Psi_T$ ist. Die Struktur der Formel ähnelt wieder einem Diffusions- und Verzweigungsprozeß, allerdings ist der Diffusion nun eine Driftbewegung überlagert. Die Singularitäten im Verzweigungsfaktor sind nun fast verschwunden, da E_L (im Gegensatz zu V) beinahe konstant ist. Genauer gesagt wird E_L konstant wenn $\Psi_T \rightarrow \Psi$. Außerdem führt der Driftterm den Zufallsprozeß vorzugsweise in solche Regionen des Raumes, in denen die Wellenfunktion groß ist. Man kann die obige Gleichung für die Greensfunktion als

$$\frac{d\tilde{G}}{dt} = -\tilde{H}\tilde{G} = -(\tilde{T} + \tilde{V})\tilde{G} , \quad \text{mit} \quad (3-29)$$

$$\tilde{T} = -D\Delta + D\nabla \cdot \mathbf{F} + D\mathbf{F} \cdot \nabla \quad \text{und} \quad (3-30)$$

$$\tilde{V} = E_L - E_0 \quad (3-31)$$

schreiben. Ähnlich wie oben setzt man an:

$$\tilde{G}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', \Delta t) = \tilde{w}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Delta t) \tilde{G}_D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', \Delta t), \quad (3-32)$$

wobei das Gewicht \tilde{w} nun gegeben ist durch

$$\tilde{w}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Delta t) = \exp[-(\Delta t/2)(E_L(\mathbf{x}) + E_L(\mathbf{x}') + \Delta t E_0)] \quad (3-33)$$

und der Propagator \tilde{G}_D durch

$$\begin{aligned} \tilde{G}_D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', \Delta t) &= \langle \mathbf{x}' | \exp(-\Delta t \tilde{T}) | \mathbf{x} \rangle \\ &= (4\pi D \Delta t)^{-3N/2} \exp \frac{[\mathbf{x}' - \mathbf{x} - D \Delta t \mathbf{F}(\mathbf{x})]^2}{4d \Delta t}. \end{aligned} \quad (3-34)$$

\tilde{G}_D ist der Propagator für eine Diffusion mit Drift und ist die Lösung für die Schrödingergleichung für f ohne den Verzweigungs-, sprich Potentialteil. Die Lösungsmethode ist genau die gleiche wie oben, nur daß der Diffusion nun eine Driftbewegung überlagert ist. Die Simulationsmethode bleibt im wesentlichen auch die gleiche, obwohl bei jedem Zeitschritt E_L und \mathbf{F} berechnet werden müssen, um \tilde{w} und \tilde{G}_D zu erhalten.

Für Systeme, die Fermionen bzw. Elektronen beinhalten, stellt sich das Problem der Antisymmetrie der Wellenfunktion. Das heißt, wenn mehr als ein Elektron im selben Spinzustand ist, muß die Wellenfunktion irgendwo das Vorzeichen wechseln. Diese Forderung ist unvereinbar mit der Tatsache, daß (3-18) und (3-28) Diffusionsgleichungen darstellen sollen, denn die Dichte der Zufallsläufer muß positiv sein. Eine Möglichkeit unter vielen, das Problem anzugehen, besteht darin, die Wellenfunktion Ψ zu zwingen, an den Knotenflächen von Ψ_T zu verschwinden, denn die Verteilungsfunktion f wird immer positiv bleiben, wenn Ψ und Ψ_T zusammen das Vorzeichen wechseln. Diese Knotenfixierungsmethode ist natürlich nur eine Variationsmethode, d. h. die erhaltene Energie ist nur eine obere Schranke für die wahre Energie. Die Verwendung mehrerer verschiedener Versuchswellenfunktionen Ψ_T kann Aufschluß über die Größe des Fehlers geben, der durch diese Näherung entsteht. [90] Aufgrund der obengenannten Einschränkungen hat die Diffusionsmethode hauptsächlich dort Anwendung gefunden, wo die Kenntnis des Grundzustands die größte Rolle spielt, z. B. eine sehr genaue Berechnung des Grundzustands des Wasserstoffmoleküls [92] und anderer kleiner Moleküle [87, 91, 93, 94] [95, 96, 97] und in Systemen, die nur aus Bosonen bestehen, z. B. bei der Untersuchung von *Clustern* des Heliums [98], des Wassers [99, 100] und bei Untersuchungen von Dreikörperereffekten bei Argon-Wasserstofffluorid-*Clustern* [101]. Aus Platzgründen ist die Angabe einer auch nur annähernd vollständigen Bibliographie nicht möglich. In den hier angegebenen Referenzen findet man viele weitere Verweise auf die vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten dieser Methode.

3.4 Monte-Carlo-Methoden in der Statistischen Mechanik

Schon bald nach der Entwicklung der Computer im zweiten Weltkrieg wurden sie auch zur Berechnung von Zustandsgrößen in der klassischen statistischen Mechanik eingesetzt. Beeinflußt von Wiener entwickelten Metropolis, die Rosenbluths und die Tellers einen stochastischen Algorithmus zur Auswertung der hochdimensionalen Integrale, die bei der Berechnung von Zustandsgrößen in einem Vielteilchensystem auftreten [106, 5]. Während in diesem bahnbrechenden und noch heute oft zitierten Artikel [5] als erste Anwendung ein zweidimensionales Gas aus harten Kugeln berechnet wurde, findet man heute Anwendungen aus jedem Gebiet der physikalischen

Chemie bzw. Biochemie. Die Rechenmethoden beschränken sich nicht mehr auf das kanonische Ensemble bei konstantem Volumen, sondern sind für alle Ensembles und Randbedingungen entwickelt worden [107]. Nur die Molekulardynamikmethode hat eine ähnlich breite Anwendung in der physikalischen Chemie gefunden.

Ein Beispiel ist das kanonische Ensemble wechselwirkender (Gas-)Teilchen in einem festen Volumen. Den thermodynamischen Erwartungswert einer Observablen \mathcal{O} berechnet man aus

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}_i \right] \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_i \right] \mathcal{O} e^{-E/k_B T} \quad (3-35)$$

mit

$$Z = \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}_i \right] \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_i \right] e^{-E/k_B T} \quad (3-36)$$

und

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i < j \leq N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (3-37)$$

Dabei ist Φ das intermolekulare (effektive) Potential. Es ist nur ein effektives Potential, da hier lediglich ein 2-Teilchenpotential angenommen wurde und 3-Teilchenpotentiale und höhere Terme vernachlässigt wurden. Dies führt meist zu einem Fehler von größenordnungsmäßig zehn Prozent [107]. Eine einfache Parametrisierung eines intermolekularen Potentials ist z. B. das Lennard-Jones-Potential:

$$\Phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3-38)$$

Dabei sind ϵ die Potentialtiefe und σ der *hard core* Radius. Die Impulsintegrationen lassen sich einfach ausführen, und man erhält

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_i \right] \mathcal{O} \exp \left\{ - \sum_{i < j \leq N} \Phi(r_{ij})/k_B T \right\} \quad (3-39)$$

mit $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ und

$$Z = \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_i \right] \exp \left\{ - \sum_{i < j \leq N} \Phi(r_{ij})/k_B T \right\} \quad (3-40)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f

$$f(\mathbf{x}) = \frac{\exp \left\{ - \sum_{i < j \leq N} \Phi(r_{ij})/k_B T \right\}}{\prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_i \right] \exp \left\{ - \sum_{i < j \leq N} \Phi(r_{ij})/k_B T \right\}} \quad (3-41)$$

kann dazu benutzt werden, um Schätzwerte für Observable \mathcal{O} zu erhalten, indem man \mathbf{x} -Werte mit der Verteilung $f(\mathbf{x})$ ermittelt und den Durchschnitt der daraus resultierenden $\mathcal{O}(\mathbf{x})$ bildet. Für Systeme mit vielen Teilchen – da man sich ja dem thermodynamischen Limes nähern will – kann die Ermittlung der \mathbf{x} -Werte nur mit dem Metropolis-Algorithmus oder ähnlichen Algorithmen mit Stichprobengewichtung durchgeführt werden, da ein einfaches zufälliges Erzeugen von Konfiguration aufgrund des exponentiellen Abfallverhaltens des Boltzmann-Faktors ineffizient wäre, weil die meisten der erzeugten Konfigurationen keinen Beitrag zum Integral bzw. zur Summe liefern würden.

3.5 Pfad-Integral-Monte-Carlo

3.5.1 Allgemeine Prinzipien

Das Feynmansche Pfadintegral

Um den Zusammenhang zwischen der euklidischen Formulierung des Pfadintegrals und der Zustandssumme der statistischen Mechanik zu zeigen, ist es vielleicht vorteilhaft, noch einmal kurz die Ableitung des Pfadintegrals aus der kanonischen Quantisierung zu wiederholen [105]:

Die Übergangsamplitude zwischen einem Zustand $\langle x_a(t_a) |$ und $|x_b(t_b)\rangle$, wobei $t_b - t_a = T$, lautet

$$\langle x_a(t_a) | x_b(t_b) \rangle = \langle x_a | \hat{U}(t_b, t_a) | x_b \rangle. \quad (3-42)$$

Man kann den Zeitentwicklungsoperator in eine große Anzahl $N + 1$ von Faktoren unterteilen, die nur auf einen infinitesimalen Zeitabschnitt $\epsilon \equiv t_n - t_{n-1} = (t_a - t_b)/(N + 1)$ wirken:

$$\langle x_a(t_a) | x_b(t_b) \rangle = \langle x_a | \hat{U}(t_b, t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \dots \hat{U}(t_n, t_{n-1}) \dots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_a) | x_a \rangle. \quad (3-43)$$

Nach Einschleiben eines vollständigen Satzes von Operatoren der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n| = 1, n = 1, \dots, N \quad (3-44)$$

erhält man die Übergangsamplitude als ein Produkt von N Integralen

$$\langle x_a(t_a) | x_b(t_b) \rangle = \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n(t_n) | x_{n-1}(t_{n-1}) \rangle \quad (3-45)$$

mit $x_b \equiv x_{N+1}$, $x_a \equiv x_0$, $t_b \equiv t_{N+1}$, $t_a \equiv t_0$. Dabei ist die Übergangsamplitude für infinitesimale Zeitintervalle (, die mitunter auch als Transfermatrix bezeichnet wird,) gegeben durch

$$\langle x_n(t_n) | x_{n-1}(t_{n-1}) \rangle = \langle x_n | e^{-i\epsilon \hat{H}/\hbar} | x_{n-1} \rangle. \quad (3-46)$$

Für einen Hamiltonoperator, dessen kinetischer Teil nur vom Impuls und dessen Potentialteil nur vom Ort abhängt,

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) = \hat{T} + \hat{V} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x}) \quad (3-47)$$

kann der Zeitentwicklungsoperator

$$e^{i\epsilon \hat{H}/\hbar} = e^{-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V})/\hbar} \quad (3-48)$$

mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel faktorisiert werden:

$$e^{-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V})/\hbar} = e^{-i\epsilon \hat{V}/\hbar} e^{-i\epsilon \hat{T}/\hbar} e^{-i\epsilon^2 \hat{R}/\hbar^2} \quad (3-49)$$

$$\hat{R} \equiv \frac{i}{2} [\hat{V}, \hat{T}] - \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\frac{1}{6} [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{T}]] - \frac{1}{3} [[\hat{V}, \hat{T}], \hat{T}] \right) + \dots \quad (3-50)$$

Die Terme höherer Ordnung in ϵ enthalten höhere Kommutatoren in \hat{V} und \hat{T} und wurden hier vernachlässigt. Wenn man auch die ϵ^2 -Terme wegläßt, lassen sich die restlichen Matrixelemente leicht berechnen:

$$\langle x_n | e^{-i\epsilon\hat{H}(t_n)} | x_{n-1} \rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x_n | e^{-i\epsilon V(\hat{x})/\hbar} | x \rangle \langle x | e^{-i\epsilon T(\hat{p})/\hbar} | x_{n-1} \rangle \quad (3-51)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x_n | e^{-i\epsilon V(\hat{x})/\hbar} | x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x_{n-1})/\hbar} e^{-i\epsilon T(p_n)/\hbar} \quad (3-52)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp[ip_n(x_n - x_{n-1})/\hbar - i\epsilon(T(p_n) + V(x_n))/\hbar]. \quad (3-53)$$

Dabei wurde in der zweiten Zeile verwendet, daß gilt

$$\langle x_n | e^{-i\epsilon V(\hat{x})/\hbar} | x \rangle = \delta(x_n - x) e^{-i\epsilon V(x_n)/\hbar}. \quad (3-54)$$

Letztlich erhält man nach Einsetzen der Matrixelemente die Feynmansche Pfadintegralformel

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle \approx \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] e^{iS^N/\hbar} \quad (3-55)$$

mit

$$S^N = \sum_{n=1}^{N+1} [p_n(x_n - x_{n-1}) - \epsilon H(p_n, x_n)]. \quad (3-56)$$

Im Kontinuumsimes $N \rightarrow \infty, \epsilon = (t_b - t_a)/(N+1) \rightarrow 0$ ergibt sich dann

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \int \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{iS[p,x]/\hbar} \quad (3-57)$$

mit

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt [p(t)\dot{x}(t) - H(p(t), x(t))]. \quad (3-58)$$

Die Konvergenz für glatte und zeitunabhängige Potentiale ist eine Konsequenz der Trotterschen Produktformel:

$$(e^{-i\epsilon\hat{V}/\hbar} e^{-i\epsilon\hat{T}/\hbar})^{N+1} = \lim_{N \rightarrow \infty} e^{-i\epsilon(N+1)(\hat{T}+\hat{V})/\hbar}. \quad (3-59)$$

Eine hinreichende Bedingung für die Gültigkeit der Trotter-Formel ist die Beschränktheit der Operatoren nach unten.

Betrachtet man eine Hamiltonfunktion der Form

$$H(p, x) = p^2/2m + V(x), \quad (3-60)$$

so erhält man die gitterte Wirkung in der Form:

$$S^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ p_n(x_n - x_{n-1}) - \epsilon \frac{p_n^2}{2m} - \epsilon V(x_n) \right\}. \quad (3-61)$$

Eine quadratische Ergänzung im kinetischen Term erlaubt es, die Impulsintegrale mit Hilfe der Fresnelschen bzw. Gaußschen Formel auszuführen.

$$S^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ -\frac{\epsilon}{2m} \left(p_n - \frac{(x_n - x_{n-1})}{\epsilon} m \right)^2 + \frac{m}{2} \epsilon \left(\frac{(x_n - x_{n-1})}{\epsilon} \right)^2 - \epsilon V(x_n) \right\} \quad (3-62)$$

Nun ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon}{2m} \left(p_n - \frac{(x_n - x_{n-1})}{\epsilon}\right)^2\right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon/m}}, \quad (3-63)$$

da

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[i\frac{a}{2}x^2\right] = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \frac{1}{\sqrt{i}} \text{ für } a < 0. \quad (3-64)$$

Damit ergibt sich die Feynmansche Pfadintegralformel, die erlaubt, die Übergangsamplitude als mit dem Phasenfaktor $\exp\{i\mathcal{S}^N\}$ gewichtete Summe über alle Pfade im Konfigurationsraum aufzufassen.

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon/m}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon/m}} \right] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^N\right\} \quad (3-65)$$

$$\mathcal{S}^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\epsilon} - \epsilon V(x_n) \right] \quad (3-66)$$

Im Kontinuumsimes geht die obige Summe in die Lagrangesche Form der Wirkung über. Diese ist ein Funktional von $x(t)$ und $\dot{x}(t)$.

$$\mathcal{S}[x, \dot{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(x, \dot{x}) = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] \quad (3-67)$$

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \int \mathcal{D}x e^{i\mathcal{S}[x, \dot{x}]/\hbar} \quad (3-68)$$

Hierbei ist das Integrationsmaß $\mathcal{D}x$ der Kontinuumsimes von

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon/m}} \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon/m}} \right], \quad (3-69)$$

während es im Fall des Phasenraumpfadintegrals ohne die Wurzelfaktoren vor den dx_n -Integralen und den extra Wurzelfaktor, der von der zusätzlichen Impulsintegration herrührt, definiert war. Für die spätere Verwendung erweist sich die Einführung der sog. quantenmechanischen Zustandssumme als nützlich. Sie ist definiert als die Spur des Zeitentwicklungsoperators:

$$Z_{QM}(t_b, t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \langle x_a t_b | x_a t_a \rangle = \text{Tr}(e^{i(t_b - t_a)\hat{H}/\hbar}) = \int \mathcal{D}x e^{i\mathcal{S}[x, \dot{x}]/\hbar}. \quad (3-70)$$

Dieser Pfadintegralausdruck ist symmetrisch in p und x , und das Pfadmaß $\mathcal{D}x$ steht nun für den Kontinuumsimes des Produkts

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon/m}} \right]. \quad (3-71)$$

Das euklidische Pfadintegral in der Quantenstatistischen Mechanik

Für ein System mit fester Teilchenzahl und zeitunabhängigem Hamilton-Operator, das in Kontakt mit einem Reservoir der Temperatur T steht, lassen sich die makroskopischen thermodynamischen Observablen durch die quantenstatistische Zustandssumme:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\hat{H}/k_B T}) = \sum_n e^{E_n/k_B T} \quad (3-72)$$

bestimmen. Diese kann man auch als eine auf die imaginäre Zeit

$$t_b - t_a = -\frac{i\hbar}{k_b T} \equiv -i\hbar\beta \quad (3-73)$$

fortgesetzte quantenmechanische Zustandssumme

$$Z_{QM} = \text{Tr}(e^{-i(t_b-t_a)\hat{H}/\hbar}) \quad (3-74)$$

betrachten. Die Spurbildung bedeutet hier in der Ortsraumdarstellung mit der Basis $|x\rangle$ die Integration über die Zeitentwicklungsamplitude über einen geschlossenen Weg mit $x_a = x_b \equiv x$ in der analytisch fortgesetzten (imaginären) Zeit:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | t_b | x | t_a \rangle |_{t_b-t_a=-i\hbar\beta} . \quad (3-75)$$

Man kann nun den Boltzmanfaktor $e^{-\beta\hat{H}}$ wieder als ein Produkt von $N+1$ Faktoren $e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar}$ mit $\epsilon = \hbar/k_b T(N+1)$ schreiben und erhält für die Zustandssumme eine ähnliche Pfadintegraldarstellung wie für die quantenmechanische Zustandssumme:

$$Z = \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \langle x_{N+1} | e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} | x_n \rangle \langle x_n | e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} | x_{n-1} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} | x_{N+1} \rangle \right] . \quad (3-76)$$

Genau wie im quantenmechanischen Fall gilt auch hier

$$\langle x_n | e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} | x_{n-1} \rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{ip_n(x_n-x_{n-1})/\hbar - \epsilon H(p_n, x_n)/\hbar} , \quad (3-77)$$

nur daß der Faktor i vor der Hamiltonfunktion fehlt. Das obige Produkt sieht dann folgendermaßen aus:

$$Z = \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{-S_E^N/\hbar} \right] \quad (3-78)$$

mit

$$S_E^N = \sum_{n=1}^{N+1} [-ip_n(x_n - x_{n-1}) + \epsilon H(p_n, x_n)] . \quad (3-79)$$

Im Kontinuumlimes $N \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$ erhält man wieder

$$Z = \int \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p_n}{2\pi\hbar} e^{-S_E[p, x]/\hbar} \quad (3-80)$$

mit

$$S_E = \int_0^{\hbar\beta} d\tau [-ip(\tau)\dot{x}(\tau) + H(p(\tau), x(\tau))] . \quad (3-81)$$

S_E steht für euklidische Wirkung, da die Pfade im Phasenraum in der imaginären Zeit $\tau = it$ verlaufen.

Zur Bestimmung lokaler thermodynamischer Observablen benutzt man die sog. Dichtematrix

$$\rho(x_b, x_a) \equiv Z^{-1} \langle x_b | e^{-\beta\hat{H}} | x_a \rangle , \quad (3-82)$$

deren Diagonalelemente die Teilchendichte $\rho(x_a)$ enthalten.

$$\rho(x_a) \equiv Z^{-1} \langle x_a | e^{-\beta\hat{H}} | x_a \rangle . \quad (3-83)$$

Der Faktor Z^{-1} normiert das Raumintegral über ρ auf 1. Durch Einschleiben eines vollständigen Satzes von Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des Hamilton-Operators erhält man die sog. Spektralzerlegung

$$\rho(x_a) = \sum_n |\psi_n(x_a)|^2 e^{-\beta E_n} / \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (3-84)$$

$\rho(x_a)$ ist die mittlere normierte Teilchendichte in Abhängigkeit von der Temperatur, da $|\psi_n(x_a)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Systems in den Eigenzuständen $|n\rangle$ im Konfigurationsraum und $e^{-\beta E_n} / \sum_n e^{-\beta E_n}$ die normierte Wahrscheinlichkeit angibt, mit der das System im Zustand $|n\rangle$ gefunden werden kann.

Im Limes $T \rightarrow 0$ bleibt nur der Grundzustand übrig, und man erhält aus ρ die Wahrscheinlichkeitsverteilung im Grundzustand.

In Analogie zur Quantenmechanik kann auch in der Quantenstatistik einen 'Zeitentwicklungsoperator' in der imaginären Zeit eingeführt werden:

$$\hat{U}_E \equiv e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}/\hbar} \quad (3-85)$$

mit den lokalen Matrixelementen in imaginärer oder euklidischer Zeit $\tau = it$

$$\langle x_b \tau_b | x_a \tau_a \rangle = \langle x_b | \hat{U}_E(\tau_b, \tau_a) | x_a \rangle \quad (3-86)$$

Die Zustandssumme ergibt sich durch Integration über die Diagonalelemente

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x \hbar \beta | x 0 \rangle = \text{Tr}(e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}/\hbar})_0^{\hbar\beta} \quad (3-87)$$

Die Dichtematrix ergibt sich nach Division durch den Normierungsfaktor Z .

Eine Pfadintegraldarstellung für die Dichtematrix erhält man mit den gleichen technischen Argumenten wie im Fall der quantenmechanischen Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude. Mit einer Gitterung der euklidischen Zeit:

$$\langle x_b \tau_b | x_a \tau_a \rangle \approx \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] e^{-S_E^N/\hbar} \quad (3-88)$$

mit

$$S_E^N = \sum_{n=1}^{N+1} [-ip_n(x_n - x_{n-1}) + \epsilon H(p_n, x_n)] \quad (3-89)$$

Im Kontinuumsimes ergibt sich - wie im quantenmechanischen Fall - wieder

$$\langle x_b \tau_b | x_a \tau_a \rangle = \int \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p_n}{2\pi\hbar} e^{-S_E[p, x]/\hbar} \quad (3-90)$$

Betrachtet man wieder eine Hamiltonfunktion der Standardform

$$H(p, x) = p^2/2m + V(x), \quad (3-91)$$

so kann man die Impulse ebenso mit Hilfe einer quadratischen Ergänzung ausintegrieren und erhält die euklidische Form des Ortsraumpfadintegrals.

$$\begin{aligned} \langle x_b \tau_b | x_a \tau_a \rangle &= \int \mathcal{D}x \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{m}{2} (\delta_\tau x)^2 + V(x) \right] \right\} \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\epsilon^2} - V(x_n) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3-92)$$

Im Kontinuumsimes findet man für die quantenstatistische Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}x e^{-S_E[x, \dot{x}]/\hbar}. \quad (3-93)$$

Dabei steht S_E für die euklidische Form der Lagrangeschen Wirkung:

$$S_E[x, \dot{x}] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau L_E(x, \dot{x}) = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right]. \quad (3-94)$$

Hierbei ist das Integrationsmaß $\mathcal{D}x$ der Kontinuumsimes von

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \right]. \quad (3-95)$$

Wegen der Spurbildung über x fällt der Vorfaktor $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}}$ weg.

Importance Sampling

Die Monte-Carlo-Methode wird gerne dann verwendet, wenn es gilt, hochdimensionale Integrale zu berechnen, bei denen Methoden, die ein Netz von Stützstellen, d. h. eine feste Anzahl von Stützstellen in jeder Richtung, verwenden, astronomisch lange Rechenzeiten erfordern würden. Als Beispiel sei das Pfadintegral gewählt. Man approximiert das Integral $\int f(\mathbf{x}) \mathcal{D}\mathbf{x}$ durch eine Summe mit endlich vielen Termen $\sum_{\nu} f(\mathbf{x}_{\nu}) \Delta\mathbf{x}_{\nu}$. Wenn allerdings, wie in diesem Fall, der Integrand $f(\mathbf{x}) = \exp -S(\mathbf{x})$ über viele Größenordnungen variiert, selbst für nicht allzugroße Zeitintervalle T , wird eine einfache Monte-Carlo-Methode, die nur Stichproben an den zufällig ausgewählten Stützpunkten \mathbf{x}_{ν} entnimmt, um aus dem Mittelwert den Wert des Integrals zu bestimmen, immer noch astronomisch lange Rechenzeiten brauchen, um den statistischen Fehler soweit zu drücken, daß das Ergebnis einen praktischen Wert hat. Der Grund ist einfach der, daß die meisten Terme, die an den Stützstellen berechnet werden, wegen der exponentiellen Unterdrückung so klein sind, daß sie zum Integral bzw. der Summe praktisch nichts beitragen.

Die von Metropolis und anderen [5] eingeführte Monte-Carlo-Methode basiert dagegen auf der Idee des *importance sampling*, d. h. der Stichprobenentnahme mit Gewichtung [108]. Dabei werden die Stützstellenpunkte nicht vollkommen wahllos gesetzt, sondern sind in den Regionen des Konfigurationsraumes konzentriert, die den dominanten Beitrag zum Wert des Integrals liefern werden. Analog zur statistischen Mechanik wählt man \mathbf{x}_{ν} , die entsprechend der Boltzmannverteilung

$$P^{eq}(\mathbf{x}_{\nu}) \mathcal{D}\mathbf{x} = \frac{\exp(-S(\mathbf{x}_{\nu})) \mathcal{D}\mathbf{x}}{\int \mathcal{D}\mathbf{x} \exp(-S(\mathbf{x}_{\nu}))} \quad (3-96)$$

verteilt sind. Dann wird die MC-Abschätzung \bar{A} für die Größe $\langle A \rangle$ einfach das arithmetische Mittel

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^M A(\mathbf{x}_{\nu}), \quad (3-97)$$

wobei M die Gesamtzahl der in der Monte-Carlo-Rechnung generierten unabhängigen Stichproben, d. h. verschiedenen Konfigurationen, ist. Man kann das *importance sampling* dadurch realisieren, indem man einen Markov-Prozeß benutzt, um die M Konfigurationen $\{\mathbf{x}_{\nu}\}$ zu erzeugen. Dieser Prozeß ist so konstruiert, daß im Limes M gegen Unendlich die Wahrscheinlichkeit des Auftretens einer Konfiguration \mathbf{x}_{ν} in der Markovkette durch die erste Gleichung (3-96) gegeben

ist. Im folgenden werden die grundlegenden Eigenschaften von Markovprozessen kurz dargestellt, sofern sie zum Verständnis des Metropolis-Algorithmus wichtig sind. Ein Markovprozeß kann durch eine $N \times N$ Matrix W ($N \leq \infty$) mit Einträgen $W_{ij} \geq 0$, die die Bedingung

$$\sum_j W_{ij} = 1 \quad (3-98)$$

für alle i erfüllen, beschrieben werden. Wir unterdrücken im folgenden die Fettdruckschreibweise für den Konfigurationsvektor \mathbf{x} . Die W_{ij} sollen die Wahrscheinlichkeit darstellen, daß ein System, das gegenwärtig im Zustand s_i ist, einen Übergang zu einem Zustand s_j macht, und zwar in einem sog. Markovschritt, den man sich als einen elementaren Zeitschritt vorstellen kann. Dabei bezeichnen die Indizes i und j die möglichen Konfigurationen des Systems. Man kann diese Definition erweitern, um auch kontinuierliche Zustandsräume zu erfassen, indem man eine Übergangswahrscheinlichkeitsdichte $W(x, x')$ für den Übergang $x \rightarrow x'$ definiert, die den Bedingungen

$$W(x, x') \geq 0 \quad (3-99)$$

und

$$\int dx' W(x, x') = 1 \quad (\text{für alle } x) \quad (3-100)$$

genügt. In einem Zweischrittprozeß von x nach x' (oder von s_i nach s_j) muß das System einen Zwischenzustand x_1 passieren. Die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs von x nach x' in zwei Schritten in einer Markovkette ist gegeben durch

$$W^{(2)}(x, x') = \int dx_1 W(x, x_1) W(x_1, x') . \quad (3-101)$$

Für ein diskretes System entspräche dies einer Matrixmultiplikation. Ähnlich gilt für den n -Schrittprozeß

$$\begin{aligned} W^{(n)}(x, x') &= \int dx_1 \dots \int dx_{n-1} W(x, x_1) W(x_1, x_2) \dots W(x_{n-1}, x') \quad (3-102) \\ &= \int dx_\alpha W^{(n-1)}(x, x_\alpha) W(x_\alpha, x') . \end{aligned}$$

Das Langzeitverhalten des Systems kann man ermitteln, indem man die Eigenschaften von $W^{(n)}$ im Limes $n \rightarrow \infty$ ermittelt. Mit den oben definierten Eigenschaften der 'Übergangsmatrix' kann gezeigt werden, daß

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W^{(n)}(x, x') = P^*(x') , \quad (3-103)$$

für alle x . Im Limes großer n ist die Übergangswahrscheinlichkeitsfunktion unabhängig von der Anfangskonfiguration und durch $P^*(x)$ gegeben. Wenn man in 3-103 den Limes $n \rightarrow \infty$ nimmt, wird ersichtlich, daß $P^*(x)$ stationär ist in dem Sinne, daß:

$$P^*(x') = \int dx_\alpha P^*(x_\alpha) W(x_\alpha, x') . \quad (3-104)$$

Mit anderen Worten. P^* ist ein Linkseigenvektor von W mit dem Eigenwert eins. Aus dem Vergleich mit (3-99) und (3-100) sieht man auch, daß $P^*(x)$ die Anforderungen, die an eine Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion gestellt werden, erfüllt :

$$P^*(x) \geq 0 \quad (\text{für alle } x) , \quad (3-105)$$

und

$$\int dx' P^*(x') = 1. \quad (3-106)$$

Es ist einfach zu zeigen, daß P^* eindeutig bestimmt ist. Sei P eine andere Wahrscheinlichkeitsdichte, die die obigen Bedingungen erfüllt. Dann gilt

$$P(x') = \int dx_\alpha P(x_\alpha) W(x_\alpha, x'). \quad (3-107)$$

Wenn obige Gleichung n mal iteriert wird, erhält man

$$P(x') = \int dx_\alpha P(x_\alpha) W^{(n)}(x_\alpha, x'). \quad (3-108)$$

Im Limes $n \rightarrow \infty$ findet man

$$\begin{aligned} P(x') &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int dx_\alpha P(x_\alpha) W^{(n)}(x_\alpha, x') \\ &= \int dx_\alpha P(x_\alpha) P^*(x') \\ &= P^*(x') \text{ für alle } x'. \end{aligned} \quad (3-109)$$

Daher ist P^* ein eindeutig bestimmter Fixpunkt des Markov-Prozesses im Limes unendlich langer Kettenlänge. Letztlich kann man die Bedingungen, die $W(x, x')$ erfüllen muß, wie folgt zusammenfassen:

$$W(x, x') > 0 \quad (\text{wenn } P(x) > 0 \text{ und } P(x') > 0), \quad (3-110)$$

$$\int dx' W(x, x') = 1, \quad (3-111)$$

$$P^{eq}(x') = \int dx P^{eq}(x) W(x, x'), \quad (3-112)$$

wobei P^{eq} die Wahrscheinlichkeitsdichte ist, mit der die Stichproben bei der Umwandlung des Integrals in eine Summe gewichtet werden sollen. Eine einfache Möglichkeit, die obigen Bedingungen zu erfüllen, ist sich auf die Erfüllung der Bedingung des detaillierten Gleichgewichts zu beschränken:

$$\frac{W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{W(\mathbf{x}', \mathbf{x})} = \frac{P^{eq}(\mathbf{x}')}{P^{eq}(\mathbf{x})}. \quad (3-113)$$

P^{eq} ist ein Eigenvektor von W , da gilt

$$\begin{aligned} P^{eq}(x') &= \int dx P^{eq}(x) W(x, x') \\ &= \int dx P^{eq}(x) W(x', x) \frac{P^{eq}(x')}{P^{eq}(x)} \\ &= \int dx W(x', x) P^{eq}(x') \\ &= P^{eq}(x'). \end{aligned} \quad (3-114)$$

Die vorletzte Gleichung (3-113) legt $W(x, x')$ immer noch nicht eindeutig fest. Es gibt verschiedene Wege, von einer Konfiguration zur nächsten zu gehen. In dieser Arbeit werden konsekutiv die Konfigurationsvariablen jeweils eines Zeitpunktes im Zeitgitter verändert. Also ist W in diesem Fall eine Ein-Schritt-Übergangswahrscheinlichkeit W_s . Die *detailed balance*-Bedingung ist in diesem Fall sehr einfach. Wenn man den 'Boltzmann-Faktor' vom Anfang dieses Unterkapitels

für P^{eq} einsetzt und alle Variablen außer denen auf der Zeitscheibe j , die hier kollektiv mit x_j bezeichnet werden, festhält, findet man

$$\frac{W_s(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{W_s(\mathbf{x}', \mathbf{x})} = \frac{e^{-S(x'_j)}}{e^{-S(x_j)}}, \quad (3-115)$$

wobei $S(x_j)$ der Teil der Wirkung ist, der nur von x_j und seinen nächsten Nachbarn (in der Zeit) abhängt. Der Markov-Prozeß ist dadurch definiert, daß man sukzessive alle Variablen des Zeitgitters sehr oft besucht, wobei besuchen die Anwendung von $W(x \rightarrow x')$ auf einen bestimmten Zeitpunkt des Zeitgitters meint. Einen Durchgang durch das ganze (Zeit-)Gitter bezeichnet man als eine Monte-Carlo-Iteration oder auch *sweep*. Wenn alle Variablen des Gitters besucht wurden, geht man zur nächsten Iteration über. Die Matrix, die den Monte-Carlo-Prozeß für eine Iteration definiert, ist gegeben durch:

$$W^{(N)} = W_s(x'_N, x_N)W_s(x'_{N-1}, x_{N-1}) \dots W_s(x'_2, x_2)W_s(x'_1, x_1). \quad (3-116)$$

$$W_s(x'_j, x_j) \sim e^{-S(x'_j)}. \quad (3-117)$$

Der Metropolis-Algorithmus

Die historisch erste und auch heute noch weit verbreitete Methode, die detailed Balance Bedingung zu erfüllen, wurde von Metropolis u.a. eingeführt [106, 5]. Die einfachste Form für W_s ist gegeben durch

$$W_s(x_j, x'_j) = \frac{1}{N_0} (1 \cdot \Theta(S(x_j) - S(x'_j)) + \exp(-\Delta S(x'_j, x_j)) \Theta(S(x'_j) - S(x_j))) \quad (3-118)$$

$$+ \int dx' (1 - \exp(-\Delta S(x'_j, x_j)) \Theta(S(x') - S(x_j))) \delta(x'_j - x_j),$$

wobei $\Delta S(x', x) = S(x') - S(x)$ und N_0 das Volumen der Konfigurationsmannigfaltigkeit ist. Eine algorithmische Beschreibung der obigen Formel könnte folgendermaßen lauten: Man beginnt mit einem willkürlich gewählten neuen Wert x'_j mit gleichverteilter Wahrscheinlichkeitsdichte. Dieser Wert wird als Ersatz für x_j 'vorgeschlagen'. Wenn sich durch die Ersetzung von x_j durch x'_j die Wirkung verringert, wird der Vorschlag akzeptiert d. h. die Variable zur Zeit j auf den neuen Wert x'_j gesetzt. Wenn $\Delta S \geq 0$ ist, wird eine Zufallszahl ρ mit einer gleichverteilten Wahrscheinlichkeitsdichte zwischen 0 und 1 generiert, und die Variable wird nur auf den Wert x'_j gesetzt, wenn $\exp(-\Delta S) > \rho$. Andernfalls behält die Gittervariable ihren früheren Wert x_j . Danach geht man zum nächsten Gitterort und/oder neuen Zeitscheibe über. Diese 'nächste' Zeitscheibe muß nicht unbedingt die benachbarte sein, sondern kann willkürlich gewählt oder jeweils die übernächste sein, was sich bei einer vektorisierten Implementierung des Algorithmus als nützlich erweist, da so Abhängigkeiten, die durch die Tatsache entstehen, daß der kinetische Teil der Wirkung nichtlokal ist, vermieden werden können. Man teilt also das Zeitgitter in gerade und ungerade Zeitebenen und besucht abwechselnd nur die geraden oder ungeraden bei einem Durchgang. (Der Algorithmus wird gern Rot-Schwarz genannt.) Man sieht leicht, daß der obige Metropolis-Algorithmus die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts erfüllt. Falls x und x' so gewählt sind, daß $S(x') < S(x)$ ist, gilt $W_s(x, x') = 1$ und $W_s(x', x) = \exp(-\Delta S(x, x'))$. Umgekehrt gilt, wenn $S(x') > S(x)$, $W_s(x, x') = \exp(-\Delta S(x', x))$ und $W_s(x', x) = 1$. Für die spätere Diskussion ist es vorteilhaft, die Übergangswahrscheinlichkeit(-sdichte) $W(x, x')$

in eine 'a priori' Vorschlags-Verteilung(-sdichte) $T(x, x')$ und eine Akzeptanzwahrscheinlichkeit(-sdichte) $A(x, x')$ aufzuteilen,

$$W(x, x') = T(x, x')A(x, x'). \quad (3-119)$$

Im allgemeinen Fall ergibt sich die Akzeptanzwahrscheinlichkeit $A(x, x')$ zu

$$A(x, x') = \min\left[1, \frac{T(x', x)P^{eq}(x')}{T(x, x')P^{eq}(x)}\right]. \quad (3-120)$$

In der einfachsten Methode wird $T(x, x')$ so gewählt, daß das neue x' mit konstanter Wahrscheinlichkeit innerhalb eines Würfels mit der Seitenlänge s (der sog. 'Schrittweite') liegt. In diesem Fall ist $T(x, x') = T(x', x)$, da s in beiden Fällen gleich ist und somit die Wahrscheinlichkeit von einem gegebenen x nach x' zu gelangen genauso groß ist, wie die Wahrscheinlichkeit von x' wieder nach x zu gelangen. Die obige Gleichung vereinfacht sich zu

$$A(x, x') = \min\left[1, \frac{P^{eq}(x')}{P^{eq}(x)}\right]. \quad (3-121)$$

Für nichttriviale Übergangswahrscheinlichkeiten ergibt sich für die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts

$$\frac{W(x, x')}{W(x', x)} = \frac{T(x', x)P^{eq}(x')}{T(x, x')P^{eq}(x)}. \quad (3-122)$$

Wenn man für eine gegebene Übergangsregel die Nachbarschaft $N(x)$ eines Punktes im Zustandsraums definiert als die Menge der Zustände x' , die man in einem Schritt erreichen kann, sieht man sofort, daß diese Nachbarschaft reflexiv sein muß. Das heißt, wenn x' in der Nachbarschaft von x ist, ist x auch in der Nachbarschaft von x' . Andernfalls wäre die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts nicht mehr zu erfüllen.

Berechnung der Grundzustandsenergie

Die Berechnung der Grundzustandsenergie eines Systems mit der Pfadintegralmethode erweist sich als schwieriger als erwartet [111, 110]. Zwar ist es im Prinzip einfach, den niedrigsten Energieeigenwert aus

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle H \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} [\text{Tr}(e^{-HT/\hbar} H) / \text{Tr} e^{-HT/\hbar}] \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{-1}{T} \frac{\partial}{\partial (\hbar^{-1})} \ln Z \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{-1}{T} \frac{\partial}{\partial (\hbar^{-1})} \ln \int \mathcal{D}e^{-S[x]/\hbar} \end{aligned} \quad (3-123)$$

zu berechnen, aber der geschwindigkeitsabhängige Teil der Wirkung divergiert in der diskretisierten Form der obigen Gleichung mit verschwindendem Zeitschritt ϵ . Während der Erwartungswert des Potentialteils des Hamiltonian einfach als Mittelwert der Stichproben (Anzahl der Stichproben sei K) des für jede Stichprobenkonfiguration über die Zeit gemittelten Potentials (N Zeitscheiben) genommen werden kann, da das Potential eine 'lokale' Größe in der imaginären Zeit ist, deren Kontinuumsliches $\epsilon \rightarrow 0$ problemlos ist,

$$\langle V \rangle = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \bar{V}_k, \quad \bar{V}_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} V_i. \quad (3-124)$$

ist die kinetische Energie nichtlokal in der imaginären Zeit und fluktuiert mit kleiner werdendem Zeitschritt

$$\langle E_{kin} \rangle = \left\langle \frac{1}{2\epsilon} - m \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{2\epsilon^2 \hbar^2} \right\rangle, \quad (3-125)$$

wobei die Erwartungswertklammern auf der rechten Seite der Gleichung Mittelung über die Stichprobe und die imaginäre Zeit bedeuten. Der obige Ausdruck für die kinetische Energie ist Teil des sog. Barker-Schätzers für die Gesamtenergie für ein Teilchen in einer Dimension [112]. (Die Verallgemeinerung im Fall mehrerer Teilchen und Dimensionen ist trivial.) Eine andere Form des Barker-Schätzers ist

$$E_0 = \frac{N}{2\beta} - \frac{mN}{2\hbar^2\beta^2} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{i-1})^2 + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i). \quad (3-126)$$

In der obigen Formel wurde die thermodynamische Sprechweise gewählt. Dabei ist $\beta = 1/k_B T$. Hier ist T die Temperatur einer klassischen statistischen Zustandssumme. Dies darf man nicht verwechseln mit der Zeitausdehnung T des Zeitgitters in der äquivalenten quantenmechanischen Zustandssumme, die hier β entspricht.

Ein anderer oft verwendeter Schätzer umgeht die Probleme mit dem Term für die kinetische Energie, indem das Virialtheorem verwendet wird, um den Erwartungswert der kinetische Energie durch den Erwartungswert der potentiellen Energie auszudrücken:

$$\frac{1}{2} m \langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{1}{2} m \langle \dot{x} \cdot V'(x) \rangle. \quad (3-127)$$

Entsprechend ergibt sich der sog. Virialschätzer zu

$$E_V = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N x_i \frac{\partial V(x_i)}{\partial x_i} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i). \quad (3-128)$$

Beide Schätzer ergeben im Limes einer großen Anzahl von Konfigurationen den gleichen Wert. Sie unterscheiden sich aber in der Größe ihrer Varianz. Herman et al. behaupteten [111], der Virialschätzer wäre ziemlich unabhängig von der Zahl der Diskretisierungspunkte N , während die Varianz des Barker-Schätzers linear mit N zunähme. Dies führte zu einer Empfehlung des Virialschätzers. Andererseits zeigten Giasanti und Jacucci [113], das die Korrelationslänge des Virialschätzers schneller als linear mit N wächst, während diejenige des Barker-Schätzers nur schwach mit N ansteigt, so daß in realistischen Simulationen, bei denen auch die Autokorrelation der einzelnen erzeugten Konfigurationen eine Rolle spielt, der Virialschätzer dem Barker-Schätzer keineswegs überlegen wäre. Schließlich stellten Cao und Berne [114] fest, daß die Genauigkeit der beiden Schätzer stark von der Art des verwendeten Monte-Carlo-Algorithmus abhängt. Weiterhin behaupteten sie, daß bei Verwendung optimaler Methoden der Virialschätzer geeigneter als der Barker-Schätzer wäre. Um das Maß der Verwirrung voll zu machen, wiederholten Fernandes et al. diese Untersuchung für die Modellsysteme des harmonischen Oszillators, des asymmetrischen *double-well*-Potentials und des Morse-Oszillators für verschiedene β -Werte und verschiedene Werte der jeweiligen Potentialgradienten. Dabei wurden zwei verschiedene, fortgeschrittenere Monte-Carlo-Algorithmen verwendet: Der einfache Metropolisalgorithmus mit periodischen Translationen der ganzen Konfiguration und das sog. Normalmoden-Verfahren. Die Varianz wurde unter Einbeziehung der Autokorrelationslänge in die Berechnung der 'naiven' Varianz, d. h. der Varianz, die man unter der Annahme vollständig unabhängiger Stichproben errechnet, bestimmt. Für beide MC-Verfahren wurde gefunden, daß der Barker-Schätzer sich mehr für Systeme mit niedriger Temperatur und großem Potentialgradienten eignet, in denen

Quanteneffekte eine größere Rolle spielen, während der Virialschätzer besser dort zum Einsatz kommen sollte, wo Quanteneffekte keine so große Rolle spielen, also bei hoher Temperatur und kleinen Potentialgradienten.

Einschränkend muß man sagen, daß in der obengenannten Studie nur eine Diskretisierung mit 25 Zeitscheiben vorgenommen wurde, so daß Fehler durch endlichen Zeitschritt, die insbesondere für Systeme mit großen Potentialgradienten wichtig werden, – siehe das Unterkapitel über endliche Zeitschrittfehler – spürbar werden sollten. Denn variiert man bei fester Anzahl N von Zeitscheiben β , so ändert sich auch gleichzeitig die Größe des Zeitschritts ϵ . Zwar haben Fernandez [110] et al. für den Morse-Oszillator 250 Zeitscheiben verwendet und behaupten, daß ihre Ergebnisse sich nicht änderten, doch wäre die Problematik es wert, diese Untersuchung für große N und konstanten Zeitschritt, bzw. mit einer Zeitschrittkorrektur zu wiederholen.

Angeregte Zustände

Während die Berechnung des ersten angeregten Zustands über dem Grundzustand aus dem Abklingen der Korrelationsfunktionen relativ einfach zu bewerkstelligen ist, auch wenn das Signal mit zunehmendem Abstand eine immer größere Varianz aufweist und bald darauf 'im Rauschen versinkt', ist die Berechnung höherer angeregter Zustände aus demselben Grund schwierig, da die Beiträge zur Korrelationsfunktion exponentiell mit der Energiedifferenz abklingen. Man kann also nur für kleine Zeitabstände einen Beitrag erwarten, der dann nur einer unter vielen ist. Da ein Multiexponential-*fit* schwierig, d. h. numerisch instabil ist, werden andere Verfahren zur Berechnung der angeregten Zustände untersucht. Eins davon besteht darin, das Abfallverhalten einer Korrelations-*matrix* zu untersuchen [115, 116]:

$$C_{ij}(\tau) = \langle \mathcal{O}_i^*(\tau) \mathcal{O}_j(0) \rangle - \langle \mathcal{O}_i^*(\tau) \rangle \langle \mathcal{O}_j(0) \rangle . \quad (3-129)$$

Diese besteht aus allen möglichen Kombinationen von N geeignet gewählten Observablen \mathcal{O}_i , die die gleichen Symmetrieeigenschaften haben, d. h. sich als Projektoren auf einen bestimmten Teil des Spektrums eignen.

Im Limes großer imaginärer Zeit τ hat die Spektralzerlegung der Korrelationsmatrix die Form:

$$C_{ij}(\tau) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} e^{-\tau(\Delta E_{\alpha})} \langle 0 | \mathcal{O}_i^*(0) | \alpha \rangle \langle \alpha | \mathcal{O}_j(0) | 0 \rangle , \quad (3-130)$$

wobei ΔE_{α} die Energiedifferenzen des Systems sind. Die Observablen \mathcal{O} müssen so gewählt sein, daß die N -Komponentenvektoren $v_i^{\alpha} = \langle \alpha | \mathcal{O}_i(0) | 0 \rangle$ ($\alpha = 1, \dots, N$) linear unabhängig sind und sowohl den Beitrag der ersten N angeregten Zustände maximieren als auch den Einfluß der höheren angeregten Zustände auf die Korrelationsmatrix minimieren. Dazu muß die Zahl der unabhängigen Operatoren größer-gleich N sein. In der Praxis ist es vorteilhaft, die Zahl der unabhängigen Operatoren r größer als N zu wählen, um dem Einfluß der statistischen Fluktuationen in der Korrelationsmatrix zu begegnen. Im Prinzip gilt für $\tau \rightarrow \infty$:

$$\lambda_{\alpha}(\tau) = c_{\alpha} e^{-\tau \Delta E_{\alpha}} [1 + O(e^{-\tau \Delta \Delta E_{\alpha}})] , \quad (3-131)$$

wobei $\Delta \Delta E_{\alpha}$ der Abstand zwischen ΔE_{α} und den anderen Spektralwerten ΔE_{β} ist. Es wurde angenommen, daß die Eigenwerte der Korrelationsmatrix $C(\tau)$ so angeordnet sind, daß $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_r$. Leider kann $C(\tau)$ gewöhnlich für große τ nicht sehr genau bestimmt werden, so

daß der Fehlerterm in der obigen Gleichung nicht vernachlässigbar ist. Eine bessere Methode ist es, von einem generalisierten Eigenwertproblem

$$C(\tau)u = \lambda(\tau, \tau_0)C(\tau_0)u \quad (3-132)$$

zu starten, wobei τ_0 fest gewählt und klein ist. Dabei berechnet man

$$\lambda(\tau, \tau_0) \approx C(\tau_0)^{-1/2}C(\tau)C(\tau_0)^{-1/2} \quad (3-133)$$

und bestimmt ΔE_α aus

$$\Delta E_\alpha = \ln \left(\frac{\lambda_\alpha(\tau, \tau_0)}{\lambda_\alpha(\tau + \epsilon, \tau_0)} \right), \quad (3-134)$$

wobei man τ so groß wie möglich wählt und τ_0 klein ist.

Korrelationsfunktion und *mass gap*

Mit der obigen Methode für angeregte Zustände ist man wieder – wie bei der Variationsmethode – darauf angewiesen, eine möglichst große Basis für einen Zustand bestimmter Symmetrie zu suchen.

Wenn man nur an dem *mass gap* interessiert ist, kann man sich, wie oben erwähnt, darauf beschränken, das Abfallverhalten einer Korrelationsfunktion zu bestimmen [109]:

Wie im Unterkapitel über Korrelationsfunktionen auf einen endlichen Gitter noch genauer ausgeführt wird, erhält man den *mass gap* in euklidischer Feldtheorie mit Hilfe der Gleichung

$$\frac{C_O(t)}{C_O(t - \delta t)} = \exp(-m\delta t). \quad (3-135)$$

Dabei ist $C_O(t)$ die verbundene Korrelationsfunktion.

$$\begin{aligned} C_O(t) &= \langle 0|O(0)O(t)|0 \rangle_c \\ &= \langle 0|O(0)O(t)|0 \rangle - \langle 0|O(0)|0 \rangle \langle 0|O(t)|0 \rangle. \end{aligned} \quad (3-136)$$

Der Vakuumerwartungswert eines Operators O $\langle 0|O|0 \rangle$ wird mit Hilfe des euklidischen Pfadintegrals berechnet:

$$\langle 0|O|0 \rangle = Z^{-1} \int \mathcal{D}x O \exp(-S_E) \quad (3-137)$$

$$Z = \int \mathcal{D}x \exp(-S_E). \quad (3-138)$$

Dabei ist S_E die euklidische Wirkung, die durch analytische Fortsetzung in der Zeit $t \rightarrow it$ erhalten wird. In diskretisierter Form schreiben sich die obigen Gleichungen wie folgt:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}x &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dx_1 \dots \int dx_i \int dx_{i+1} \dots \int dx_{N-1} \\ S_E &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2m\epsilon} + \frac{(V(x_i) + V(x_{i+1}))}{2} \epsilon. \end{aligned} \quad (3-139)$$

In dieser Notation bedeutet $x_i \equiv x(t_i)$, da die Zeit wie folgt diskretisiert wurde:

$$\begin{aligned} t_N - t_0 &= N\epsilon = T \\ t_{i+1} - t_i &= \epsilon. \end{aligned} \quad (3-140)$$

Bei der Grenzwertbildung $\lim \epsilon \rightarrow 0$ muß N entsprechend erhöht werden, um T konstant zu halten. Erst danach läßt man T gegen Unendlich gehen, um den Vakuum Erwartungswert zu erhalten.

Bei einer numerischen Auswertung des Pfadintegrals müssen ϵ und T natürlich ungleich Null bzw. endlich bleiben. Man wählt meist periodische Randbedingungen in der Zeit, d.h. $x_0 = x_T$. Wenn E_i einen typischen Energieeigenwert des Systems bezeichnet, sollte für ϵ und T gelten

$$\frac{1}{T} \ll E_i \ll \frac{1}{\epsilon}. \quad (3-141)$$

Während die erste Bedingung für die Berechnungen in dieser Arbeit gut erfüllt ist, trifft man bald auf das Phänomen des sog. *critical slowing down*, wenn man versucht, den Zeitschritt wesentlich kleiner als 0.1 zu machen. (Siehe das Unterkapitel über den Metropolis-Algorithmus.) Die systematischen Fehler, die durch den endlichen Zeitschritt und die endliche Zeitausdehnung hervorgerufen werden, werden in dem Unterkapitel über die Korrelationsfunktionen mit Hilfe des Transfermatrixformalismus genauer dargestellt.

Messoperatoren

Aus den Eigenschaften des in dieser Arbeit behandelten Systems ergeben sich Forderungen an die Operatoren, mit denen die *mass gaps* "gemessen" werden [40]:

Die Operatoren, die in den Matrixelementen $\langle 0 | \mathcal{O}_n | n \rangle$ auf den Zustand $|n\rangle$ mit den jeweiligen Quantenzahlen, die hier summarisch mit n abgekürzt wurden, projizieren, müssen eichinvariant unter der verbleibenden globalen Eichtransformation der mit L skalierten Felder c_i^a sein. Unter dieser globalen, zeitunabhängigen Eichtransformation g transformieren sich die c_i^a wie folgt:

$$(c_i)^g = g c_i g^{-1}. \quad (3-142)$$

Die Operatoren \mathcal{O}_n können z. B. dadurch eichinvariant gemacht werden, daß man sie als Spuren über Produkte von $c_i = c_i^a \lambda^a$ wählt. Also

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_n &= \text{Tr}((c_i)^g (c_j)^g \dots) \\ &= \text{Tr}(g c_i g^{-1} g c_j g^{-1} \dots) \\ &= \text{Tr}(c_i c_j \dots) \end{aligned} \quad (3-143)$$

wegen der zyklischen Vertauschbarkeit unter der Spur. Da die Rotationssymmetrie des Systems nur im Limes unendlichen Volumens wiederhergestellt wird, wenn die Torustopologie keine Rolle mehr spielt, während es im Fall endlichen Volumens nur noch invariant unter den Operationen der Oktaeder-(Würfel-)gruppe ist, lassen sich die Zustände n nur nach den irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe klassifizieren. Außerdem nach der Parität $c_i \rightarrow -c_i$ und im Fall der $SU(3)$ der sog. C-Parität $c_i \rightarrow -\{c_i\}^*$. Da die Würfelgruppe eine Untergruppe der Rotationsgruppe ist, sind irreduzible Darstellungen der Rotationsgruppe, die nach dem Spin l klassifiziert werden, zwar auch Darstellungen der Würfelgruppe, aber im allgemeinen nicht mehr irreduzibel. Die folgende Tabelle zeigt die Aufspaltung der Spin-Irreps in die irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe:

<i>Spin - irrep</i>	Dim.	Irreps der Oktaedergruppe	Dim.
0	1	A_1	1
1	3	T_1	3
2	5	$E \oplus T_2$	$2 \oplus 3$
3	7	$A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$	$1 \oplus 3 \oplus 3$
4	9	$A_1 \oplus E \oplus T_1 \oplus T_2$	$1 \oplus 2 \oplus 3 \oplus 3$

Tabelle 3.1: Die irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe zu einem bestimmten Drehimpuls und ihre Aufspaltungen in die irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe

3.5.2 Systematische Fehler

Fehler durch endlichen Zeitschritt

Da man den Zeitschritt in einer numerischen Simulation nicht gegen Null gehen lassen kann, und man zusätzlich bei einem lokalen Algorithmus wie dem Metropolis-Algorithmus schnell durch das Phänomen des *critical slowing down* an die Grenzen der Rechnerkapazität stößt, sucht man nach nichtlokalen *updating*-Algorithmen wie z.B. Mehrgitterverfahren [118, 119, 120] und/oder versucht, den Einfluß des endlichen Zeitschritts durch Korrekturterme in der Wirkung zu verkleinern [121, 122].

Die Herleitung des Pfadintegrals aus der kanonischen Formulierung der Quantenmechanik basiert auf der sog. Trotterformel

$$\exp(-\beta(T + V)) = \lim_{N \rightarrow \infty} (\exp(-\beta T/N) \exp(-\beta V/N))^N, \quad (3-144)$$

wobei in diesem Fall $\beta/N = \epsilon/\hbar$ ist, T für die kinetische Energie steht (nicht für die Zeitausdehnung des Gitters) und V für die potentielle Energie. (ϵ bezeichnet den Zeitschritt.)

Für relativ kleine N stellt die obige Formel möglicherweise keine hinreichend gute Näherung dar, da typischerweise der Hamiltonoperator für ein freies Teilchen $T = \mathbf{p}^2/2m$ nicht mit dem Potentialterm V kommutiert.

Unter Verwendung der Baker-Campell-Hausdorff-Formel für die Exponentialentwicklung zweier nichtkommutierender Exponenten erhält man nach einigen Umformungen den ersten Korrekturterm, indem man $V(\mathbf{x})$ durch

$$V(\mathbf{x}) + \frac{1}{24} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\epsilon}{\hbar}\right)^2 (\nabla V(\mathbf{x}))^2 \quad (3-145)$$

ersetzt.

Bei einem komplizierten Potentialterm erhöht dieser Zusatzterm die Komplexität des Potentials und damit die Rechenzeit zur Auswertung der Wirkungsdifferenz im Bewertungsschritt des Metropolis-Algorithmus. Da die Autokorrelationszeit im Fall des *critical slowing down* mit $1/\epsilon^2$ anwächst, könnte es sich aber als praktisch erweisen, den durch den endlichen Zeitschritt hervorgerufen systematischen Fehler durch diesen Korrekturterm zu verkleinern, als durch direkte Verringerung von ϵ .

Fehler durch endliche Gittergröße

Sei T die Transfermatrix [41]. Sie hängt natürlich nicht von der L_t -Ausdehnung des Zeitgitters ab und ist positiv definit. (Die Ausdehnung des Zeitgitters wird hier mit L_t bezeichnet und nicht

etwa mit T , um jede Verwechslung mit der Bezeichnung für die Transfermatrix auszuschließen.) Der Vakuumzustand wird durch $|O\rangle$ bezeichnet. Man definiert Eigenzustände und Eigenwerte mit Hilfe von

$$T|n\rangle = \lambda_n|n\rangle \quad (3-146)$$

mit $\lambda_n = \exp(-m_n)$, $\lambda_{n+1} \leq \lambda_n$, $n \geq 0$. Man betrachte den Erwartungswert eines eichinvarianten Operators O , der lokal in der Zeit ist. Auf einem Gitter mit endlichem L_t gilt

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(T^{L_t}) = \sum_n \exp(-m_n L) \\ &= 1 + O(\exp(-m_1 L_t)) \end{aligned} \quad (3-147)$$

und

$$\langle O \rangle = Z^{-1} \sum_n \langle n | O | n \rangle \exp(-m_n L_t). \quad (3-148)$$

Die Standardmethode zur numerischen Berechnung des Massenspektrums ist die Analyse der Korrelationsfunktionen von eichinvarianten hermiteschen Operatoren.

Definiere

$$ch_m(t) = \exp(-mt) + \exp(-m(L_t - t)). \quad (3-149)$$

Die verbundenen Korrelationsfunktionen für den Operator O sind definiert durch

$$\begin{aligned} C_O(t) &= \langle O(0)O(t) \rangle_c \\ &= \langle O(0)O(t) \rangle - \langle O(0) \rangle \langle O(t) \rangle, \end{aligned} \quad (3-150)$$

wobei $t = 0, 1, 2, \dots, L_t - 1$ der Abstand in der (diskreten) Zeit ist. Die Positivität der Transfermatrix impliziert $C_O(t) > 0$. Die implizite Gleichung

$$\frac{C_O(t)}{C_O(t-1)} = \frac{ch_m(t)}{ch_m(t-1)} \quad (3-151)$$

definiert $m(t)$, die sog. effektive Masse bei der Entfernung t . Die Gleichung

$$O(0)|n\rangle = \sum_{i,n} c_i^n |i\rangle \quad c_i^n \text{ reell}, \quad c_i^n = c_n^i \quad (3-152)$$

impliziert, daß die Korrelationsfunktionen durch folgende Formel gegeben sind:

$$\begin{aligned} \langle O(0)O(t) \rangle &= Z^{-1} \text{Tr}(O T^t O T^{L_t-t}) \\ &= Z^{-1} \sum_n \langle n | O T^t O | n \rangle \exp(-m(L_t - t)) \\ &= Z^{-1} \sum_n \sum_i (c_i^n)^2 \exp(-m_i t) \exp(-m(L_t - t)). \end{aligned} \quad (3-153)$$

Der verbundene Teil ist

$$\langle O(0)O(t) \rangle_c = a_0 + \sum_{i \geq 1} a_i ch_{m_i}(t) + \sum_{i > n, n \geq 1} b_i^n ch_{(m_i - m_n)}(t) \quad (3-154)$$

mit

$$\begin{aligned} a_0 &= Z^{-1} \sum_n (c_n^n)^2 \exp(-m_n L_t) + \{Z^{-1} \sum_n (c_n^n) \exp(-m_n L_t)\} \\ &\geq 0, \\ a_i &= Z^{-1} (c_0^i)^2 \quad i=1,2,\dots, \\ b_i^n &= Z^{-1} (c_i^n)^2 \exp(-m_n L_t). \end{aligned} \quad (3-155)$$

Man kann zeigen, daß $a_0 \geq 0$ ist. Für Operatoren mit

$$c_n^n = \langle n | \mathcal{O} | n \rangle = 0 \quad \text{für } n=1,2,\dots, \quad (3-156)$$

gilt $a_0 = 0$. Andernfalls erreicht a_0 nur im Limes $L_t \rightarrow \infty$ $0 = (c_0^0)^2 - (c_0^0)^2$. Der letzte Term in Gleichung 3-154 kann auch positive konstante Terme beitragen, wenn Zustände existieren mit $m_i = m_n$ und nichtverschwindendem b_i^n . Da man außerdem keine analytische Kontrolle über die Massendifferenzen $(m_i - m_n)$ in diesen b_i^n -Termen hat, ist die niedrigste Masse, die in einer Korrelationsfunktion erscheint, wahrscheinlich nicht eine Masse, sondern eine Massen- bzw. Energiedifferenz. Die endliche Ausdehnung in der Zeit hat also nicht nur die Folge, daß aus $\exp(-mt) ch_m(t)$ wird, sondern sorgt auch dafür, daß neue Beiträge erscheinen, die für eine unvorhergesehene Abnahme der effektiven Massen für große t verantwortlich sind. Obwohl diese Beiträge exponentiell klein sind im Sinne von $\exp(-m_1 L_t)$, können sie doch die Monte-Carlo-Daten beeinflussen, wenn es eine große Zahl von beitragenden Termen gibt.

Thermalisierung

Da man meist noch keine Konfiguration besitzt, die eine hohe Vorkommenswahrscheinlichkeit hat, muß man am Beginn des Markov-Prozesses eine einfache Startkonfiguration vorgeben oder mit anderen Methoden versuchen, eine genäherte Grundzustandswellenfunktion zu erhalten. Durch die Anwendung des Markov-Prozesses wird sie sukzessive in eine Konfiguration transformiert, die mit einer Wahrscheinlichkeit entsprechend ihrem Boltzmann-Gewicht auftritt. Da der Metropolis-Algorithmus ein lokaler Algorithmus ist, braucht man viele *sweeps* durch das Gitter, bis die 'Erinnerung' an den Anfangszustand verschwunden ist. Man sagt, daß das System 'thermalisiert' wurde. Während dieser Thermalisierungsphase werden die *sweeps* durch das Gitter meist ausgeführt, ohne Messungen (außer einfachen Variablen, wie mittlere Energie, mittlerer Radius, Akzeptanzrate u.ä.) vorzunehmen. Dabei muß man allerdings beachten, daß die Mittelwerte lokaler Operatoren sich schon stabilisieren, lange bevor man numerische Konvergenz für die langreichweitigen Korrelationsfunktionen feststellen kann. Die Aussage, daß eine Konfiguration sich im Gleichgewicht befindet, ist damit ungenau formuliert, da der Mittelwert eines Operators möglicherweise eher stabil wird als der eines anderen. Beim Beweis, daß der Fixpunkt eines Markov-Prozesses nicht von der Anfangskonfiguration abhängt, diskutiert man meist nur den Fall, daß die Markov-Kettenlänge unendlich wird. In realen Anwendungen hat man es immer mit endlichen Markov-Prozessen zu tun, d. h. es ist immer ein systematischer Fehler vorhanden, der von der Abweichung vom Fixpunkt herrührt und der nicht vorhergesagt werden kann. Außerdem kann er auch noch für jeden Operator verschieden sein. Die Kunst in der Praxis besteht darin, den Fehler so zu minimieren, daß er gegenüber dem statistischen Fehler nicht ins Gewicht fällt. Um zu überprüfen, ob Thermalisierung in diesem Sinne wirklich erreicht wurde, und daß die Daten innerhalb des statistischen Fehlers nicht von der Anfangskonfiguration abhängen, kann man zwei einfache Methoden wählen. Erstens kann man den gesamten Datensatz einer Observablen in je eine Anfangs- und Endhälfte teilen und sehen, ob der Erwartungswert für jede Hälfte mit dem der anderen im Rahmen der Fehler übereinstimmt oder ob der Erwartungswert der Endhälfte mit dem Erwartungswert über den ganzen Datensatz übereinstimmt. (Wenn nicht, ist man in Schwierigkeiten, und man sollte mehr Daten am Anfang der Markov-Kette unberücksichtigt lassen.) Die zweite Möglichkeit besteht darin, die ganze Prozedur mit einer anderen Startkonfiguration zu wiederholen. Zum Beispiel kann man mit einer maximal geordneten Konfiguration beginnen ('Kalter Start')- z.B. alle Koordinatenvariablen für jede 'Zeitscheibe'

gleich Null gesetzt— oder mit einer Zufallskonfiguration ('Heißer Start'). Wieder sollten beide Erwartungswerte im Rahmen der Fehler übereinstimmen. In der vorliegenden Arbeit wurde meist die erste Methode benutzt.

Bestimmung der statistischen Fehler

Dieser Abschnitt beschäftigt sich hauptsächlich mit dem Problem der Abschätzung der statistischen Fehler von Massen, die durch Analyse der (mehr oder weniger) verrauschten Korrelationsfunktionen bestimmt werden [41].

Ein oft benutzter Schätzer der verbundenen Korrelationsfunktionen (xy) ist

$$C_{MC}(t) = \frac{1}{N} \frac{1}{L_t} \sum_{i=1}^N \sum_{z=0}^{L_t-1} \{O_i(t \oplus z) O_i(z) - \theta_O \overline{O^2}\}, \quad (3-157)$$

wobei $t \oplus z = (t + z) \bmod (L_t)$ ist und

$$\begin{aligned} \theta_O &= 1 \text{ wenn } \langle O \rangle \neq 0 ; \\ \theta_O &= 0 \text{ wenn } \langle O \rangle = 0 . \end{aligned} \quad (3-158)$$

Der Index i korrespondiert mit der i -ten Messung, und N ist die Anzahl der unabhängigen Messungen. Außerdem ist

$$\overline{O} = \frac{1}{N} \frac{1}{L_t} \sum_{i=1}^N \sum_{z=0}^{L_t-1} O_i(z) \quad (3-159)$$

der Schätzer für den Erwartungswert $\langle O \rangle$.

Binning

Die Monte-Carlo-Daten, die während einer Simulation erzeugt wurden und in der Computerlaufzeit aufeinander folgen, sind korreliert, da in den Entscheidungsschritt des Metropolis-Algorithmus ja immer die Differenz in der Wirkung zu der vorher erzeugten Konfiguration eingeht. Die Nichtbeachtung dieser Korrelationen würde zu einer Unterschätzung der statistischen Fehler führen. Zwei Standardmethoden, um mit diesem Problem fertig zu werden, sind die Berechnung der Autokorrelationsmatrix oder das sog. *binning*. Nur die letzte Methode wird in dieser Arbeit verwendet. n gewöhnlich aufeinander folgende Daten definieren einen *bin*. Die Gesamtanzahl an Daten wählt man bequemerweise als ein ganzzahliges Vielfaches von n . Dies bedeutet $N = Kn$, wobei K die Anzahl der *bins* ist. Für *gebinnte* Daten wird (3-159)

$$\overline{O} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \overline{O}_k, \quad (3-160)$$

wobei

$$\overline{O}_k = \frac{1}{n} \frac{1}{L_t} \sum_{i=1+(k-1)n}^{kn} \sum_{z=0}^{L_t-1} O_i(z) \quad (3-161)$$

der *bin*-Durchschnitt des k -ten *bins* genannt wird. Ähnliche Formeln gelten auch für die Korrelationsfunktionen. Mit K *bins* ergibt sich der Schätzer der Varianz zu

$$s^2(O) = \frac{1}{K-1} \sum_{k=1}^K (\overline{O} - \overline{O}_k)^2 \quad (3-162)$$

und der entsprechende Fehlerbalken

$$\bar{s} = \sqrt{s^2(\bar{\mathcal{O}})} = \sqrt{s^2(\mathcal{O})/K} \quad (3-163)$$

Natürlich kann die Größe $\bar{\mathcal{O}}_k$ in der obigen Gleichung jeder passende *bin*-Durchschnitt sein, z.B. die Korrelationsfunktion $C_{MC}^k(t)$. Wir betrachten hier nur jeweils gleich große *bins*. Im anderen Fall verwendet man geeignet normierte Gewichtungsfaktoren w_k ($\sum_k w_k = 1$) in einer Verallgemeinerung der obigen Formel

$$s^2(\mathcal{O}) = \frac{1}{K-1} \sum_{k=1}^K w_k (\bar{\mathcal{O}} - \bar{\mathcal{O}}_k)^2 \quad (3-164)$$

mit

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \bar{\mathcal{O}}_i \quad (3-165)$$

Um effektive Massen zu berechnen, braucht man Abschätzungen für Verhältnisse von Korrelationsfunktionen

$$R_{MC}(t) = \frac{C_{MC}(t)}{C_{MC}(t-1)} \quad (3-166)$$

Da die in der Zeit aufeinanderfolgenden Korrelationsfunktionen $C_{MC}(t-1)$ und $C_{MC}(t)$ stark korreliert sind, lassen sich die üblichen Fehlerfortpflanzungsmethoden nicht verwenden, um den Fehlerbalken von $R_{MC}(t)$ zu berechnen. Stattdessen bestimmt man den Fehler von $R_{MC}(t)$, indem man das Verhältnis der Korrelationsfunktionen selbst *binnt*. Für große Zeiten verschwindet das Signal der Korrelationsfunktionen früher oder später im statistischen Rauschen. Dies hat katastrophale Konsequenzen, sobald die Fluktuationen dazu führen, daß $R_{MC}^k \approx 0/0$. Offensichtlich wird dieses Problem zuerst für kleine *bins* kritisch und für die ganze Messung nur für sehr große t -Werte. Im letzten Fall sind die Daten natürlich nutzlos. Meist taucht in Monte-Carlo-Rechnungen dieses Problem nur für einzelne *bins* auf, verschwindet dagegen, wenn der *bin* alle Daten enthält. In solchen Fällen wird in der Regel die sog. *jack-knife*-Methode angewandt.

Jack-knife-Methode

Die *jack-knife*-Methode ersetzt (3-162) durch

$$s_J^2 \mathcal{O}_k = (K-1) \sum_{k=1}^K (\bar{\mathcal{O}} - \hat{\mathcal{O}}_k)^2, \quad (3-167)$$

wobei der Index J für *jack-knife* steht und

$$\hat{\mathcal{O}}_k = \frac{1}{K-1} \sum_{i \neq k} \bar{\mathcal{O}}_i \quad (3-168)$$

Die effektiven Massen werden mit

$$\hat{R}_{MC}^k(t) = \frac{\hat{C}_{MC}^k(t)}{\hat{C}_{MC}^k(t-1)} \quad (3-169)$$

und zusätzlich zum Vergleich mit

$$R_{MC}^k(t) = \frac{C_{MC}^k(t)}{C_{MC}^k(t-1)} \quad (3-170)$$

bestimmt, wobei die \hat{C}_{MC}^k wie oben beschrieben definiert sind. In ähnlicher Weise geht man bei der Bestimmung von Massenverhältnissen vor. Im allgemeinen stellt man aber fest, daß für die in dieser Arbeit verwendeten *bin*-Größen kaum ein Unterschied zwischen beiden Methoden festzustellen ist, solange die Korrelationsfunktionen noch nicht zu sehr von statistischen Fluktuationen beherrscht werden. Es wurde deswegen darauf verzichtet, die Fehleranalyse mit der noch aufwendigeren *bootstrap*-Methode zu wiederholen.

3.5.3 Beispielhafte Anwendungen

Feldtheorie

Eine der bekanntesten und rechenzeitintensivsten Anwendungen der MC-Methode ist die numerische Berechnung des Pfadintegrals bzw. der n -Punkt-Funktionen in der Gittereichtheorie[14]. Die Pfadintegral-Formulierung der QCD liefert schon einen Ansatzpunkt für die nötige Diskretisierung, wird doch das Pfadmaß als Grenzwert des unendlichen Produktmaßes der Feldvariablen definiert. Betrachtet man nun die Feldvariablen auf einem endlichen, diskreten Raumzeitgitter $N_s^3 N_t$, so reduziert sich die Pfadintegration auf ein endlich-dimensionales, gewöhnliches Integral [123]. Das Pfadmaß selbst ergibt sich als ein wohldefiniertes Produktmaß der Feldvariablen. Hierbei wird angenommen, daß auch in einer wechselwirkenden Theorie das Pfadmaß als Limes $N \rightarrow \infty$ eines endlichen Produktmaßes definiert werden kann.

Durch die Einführung eines hyperkubischen Gitters wird die Theorie regularisiert, da die Gitterkonstante a einen Abschneideparameter darstellt, der zusammen mit der endlichen Ausdehnung des Gitters die möglichen Frequenzen sowohl im Ultraviolett als auch im Infrarot beschränkt. Der Impulsraum wird also auf die diskrete Brillouin-Zone \mathcal{B} reduziert.

$$\mathcal{B} = \left\{ k \mid k_\mu = -\frac{\pi}{a} + \frac{l_\mu}{N_\mu} \frac{2\pi}{a}, \text{ mit } l_\mu = 0, \dots, N_\mu - 1 \right\} \quad (3-171)$$

Wie in jedem anderen Renormierungsschema, erhält man die physikalisch relevanten Aussagen im Limes eines verschwindenden Regulators, d. h. dem Kontinuums-limes $a \rightarrow 0$ der Gittertheorie. Hierbei wird das Volumen, gemessen in physikalischen Größen, natürlich konstant gehalten. Danach muß man auch das Volumen gegen Unendlich gehen lassen, d. h. man nimmt den sog. thermodynamischen Limes. Man hofft natürlich auch schon für endliches a und endliches Volumen Ergebnisse zu erhalten, die sich denen der Kontinuumstheorie hinreichend angenähert haben.

Die Gitterformulierung der QCD benutzt meist die geometrische Interpretation der Eichtheorien. In dieser Formulierung sind die Eichfelder die infinitesimalen Paralleltransporter der Materiefelder, d. h. der Quarkfelder in der QCD. Diese werden auf die einzelnen Gitterpunkte gesetzt und mittels der Eichfelder in Form eines Paralleltransports auf den verbindenden Kanten des Gitters in eichinvarianter Weise miteinander verknüpft.

Im Kontinuum ist der Paralleltransport entlang einer Kurve von x nach y durch den folgenden Ausdruck bestimmt:

$$U(x, y) = \mathcal{P} \exp \left\{ ig \int_x^y \mathbf{A}_\mu(x) \frac{dx_\mu}{d\tau} d\tau \right\} . \quad (3-172)$$

\mathcal{P} ist der sog. Pfadordnungsoperator, der für die richtige Anordnung der nicht-abelschen Felder entlang der Kurve sorgen soll. Eine lokale Farbeichtransformation $g(x)$ der Materiefelder $\Psi(x) \rightarrow g(x)\Psi(x)$ führt zum folgenden Transformationsverhalten des Paralleltransporters:

$$U(x, y) \rightarrow g(x)U(x, y)g^{-1}(y) . \quad (3-173)$$

Man kann auf diese Weise räumlich voneinander getrennte Materiefelder durch Einfügen eines Paralleltransporters zu einem eichinvarianten Ausdruck verbinden.

Führt man nun auf dem Gitter einen Paralleltransport, ausgehend vom Punkt x , entlang der Kante μ mit der Länge a aus, so erhält man aus (3-172) den folgenden Ausdruck für $U_\mu(x)$:

$$U(x, x + \hat{\mu}) = U_\mu(x) = \exp \{ ig A_\mu(x) a \}. \quad (3-174)$$

Die Beziehung zwischen dem Feldstärketensor $\mathbf{F}_{\mu\nu}$ und der kovarianten Ableitung \mathbf{D}_μ

$$[\mathbf{D}_\mu, \mathbf{D}_\nu] = ig \mathbf{F}_{\mu\nu} \quad (3-175)$$

kann man geometrisch interpretieren und den Feldstärketensor mit einem Paralleltransport entlang eines infinitesimalen Rechtecks in der $\mu\nu$ -Ebene verbinden, um eine diskretisierte Eichfeldwirkung zu erhalten. Im Fall des hyperkubischen Gitters wählt man gewöhnlich einen Paralleltransport entlang des kürzesten geschlossenen Pfades in der $\mu\nu$ -Ebene, der sog. Plaquette \mathcal{P} , obwohl auch andere geschlossene Pfade möglich wären, solange sie nur in der Entwicklung in der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ die Kontinuumswirkung liefern.

$$\begin{aligned} U_\square[x; \mu\nu] &= U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^+(x + \hat{\nu}) U_\nu^+(x) \\ &= \exp \{ ig \mathbf{F}_{\mu\nu} a^2 + \mathcal{O}(a^4) \} \end{aligned} \quad (3-176)$$

Mit dieser Beziehung läßt sich nun leicht eine eichinvariante Gitterwirkung für die reinen Eichfelder konstruieren, die den korrekten Kontinuumslikes besitzt [123].

$$S_E = \beta \sum_{\mathcal{P}} 1 - \frac{1}{6} \text{Tr}(U_\square + U_\square^+) \quad (3-177)$$

Da die Wirkung S_E eine Funktion der Paralleltransporter U ist, faßt man die Lie-Gruppenwertigen Felder U_μ als die dynamischen Variablen der Gitter-QCD auf.

Das Pfadmaß $\mathcal{D}[\mathbf{A}_\mu]$ der Kontinuumsstheorie geht in das sog. Haarsche Maß $d\bar{\mu}$ der kompakten Lie-Gruppe $SU(3)$ über.

$$\mathcal{D}[\mathbf{A}] \rightarrow \mathcal{D}[U] = d\bar{\mu}\{U\} \quad (3-178)$$

Das Haarsche Maß hat den Vorteil, endlich und eichinvariant unter Eichtransformationen zu sein, so daß man keine Eichfixierungsterme in der Wirkung benötigt. Denn da die U_μ in der Lie-Gruppe $SU(n)$ liegen und nicht in der Lie-Algebra, ist die Mannigfaltigkeit der U_μ kompakt im Gegensatz zu der der Eichfelder A_μ . Deshalb fallen die sog. kompakte und nichtkompakte Formulierung der QCD nur im Grenzfall kleiner Feldstärken und kleiner Kopplung zusammen. Diese Tatsache und die Beobachtung, daß nicht nur die nichtabelschen reinen Gittereichtheorien, sondern auch die kompakte Gitterformulierung der Quantenelektrodynamik *confinement* zeigt, haben zu Zweifeln an der kompakten Gitterformulierung geführt und zu Versuchen, auch nichtkompakte Formulierungen der nichtabelschen Gittereichtheorie zu finden. Insbesondere Cahill und Palumbo haben lange auf diesem Gebiet gearbeitet. Obwohl es jahrelang so aussah, als würden nichtkompakte Formulierungen der Gitter-QCD kein *confinement* zeigen, hat sich nun herausgestellt, daß dieser Effekt ein Artefakt war, hervorgerufen durch die Tatsache, daß die nichtkompakte Formulierung nur im Limes verschwindender Gitterkonstante eichinvariant war. Durch eine neue Formulierung, die diesen Defekt nicht aufweist, konnte *confinement* auch für die nichtkompakte Gitter-QCD in MC-Rechnungen gezeigt werden [124, 125, 126, 127].

Den fermionischen Teil der Wirkung erhält man aus der Kontinuums-Lagrangedichte der Quarkfelder ψ durch Ersetzung der Gradienten der kinetischen Energie durch die entsprechenden Differenzenquotienten.

$$S_{F, frei}^{naiv} = a^4 \sum_x \left\{ \sum_\mu \bar{\psi}(x) \gamma_\mu \frac{1}{2a} \{ \psi(x + \hat{\mu}) - \psi(x - \hat{\mu}) \} + m \bar{\psi}(x) \psi(x) \right\} \quad (3-179)$$

Der dazugehörige freie Gitterpropagator $P(k)$ besitzt im Impulsraum neben dem Pol $ka = (0, 0, 0, 0)$, den man auch im Kontinuum erwarten würde, fünfzehn weitere Pole für $k_\mu a = + - \pi$. Die Quarkmassen wurden in der obigen Diskussion unterdrückt.

$$P(k) = \left(\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \frac{isink_{\mu}a}{a} \right)^{-1} \quad (3-180)$$

Im Kontinuumsimes liefert diese Wirkung ein Spektrum aus 16 entarteten Quarks. Zur Zeit sind zwei Methoden gebräuchlich, um mit dieser Entartung fertig zu werden, nämlich die Methode von Wilson und die von Kogut und Susskind. Daneben werden natürlich ständig neue Methoden erprobt, um dieses Problem einer Lösung zuzuführen. Da die Methode der Kogut-Susskind-Fermionen etwas komplizierter ist, sei hier nur kurz die Methode der Wilson-Fermionen erläutert. Diese besteht in der Addition eines Zusatzterms zur Wirkung, des sog. Wilson-Terms, dessen Effekt darin besteht, die Massen der zusätzlich auftretenden 15 Fermionen künstlich in den Massenbereich oberhalb des durch die Gitterkonstante eingeführten Abschneideparameters $\frac{1}{a}$ zu verschieben und damit effektiv aus dem Spektrum zu entfernen.

$$S_{F, frei}^{Wilson} = S_{F, frei}^{naiv} - a^3/2 \sum_x \left\{ \sum_{\mu} \bar{\psi}(x) \{ \psi(x + \hat{\mu}) + \psi(x - \hat{\mu}) \} - 2\bar{\psi}(x)\psi(x) \right\} \quad (3-181)$$

Der durch den Wilson-Term modifizierte freie Gitter-Fermionpropagator stellt sich im Impulsraum wie folgt dar:

$$P(k) = \left(\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \frac{isink_{\mu}a}{a} + \frac{1}{a} \sum_{\mu} (1 - \cos k_{\mu}a + m) \right)^{-1} \quad (3-182)$$

Dieses kurze Kapitel kann natürlich nur einen minimalen Einblick in die Probleme und Methoden der Gittereichtheorie geben. Ausführlicher werden die Dinge in [14] diskutiert.

Tunnelprozesse in Ungeordneten Systemen

Sowohl bei der Photosynthese als auch bei der Zellatmung spielen Tunnelprozesse von Elektronen in Proteinen eine entscheidende Rolle [128].

Im Photosynthetischen Reaktionszentrum wird das nach der Lichtabsorption im sog. Speziellen Chlorophyll-Dimer freigesetzte Elektron über verschiedene Kofaktoren an die Oberfläche des Proteins geleitet. Dort wird es von Quinonen übernommen und nach deren Diffusion in der Membran nach Kollision an andere Proteinkomplexe übergeben, in deren Inneren die Bewegung des Elektrons über mehrere Porphyrin-Kofaktoren und Metall-Ionen hin zum nächsten Elektronenakzeptor den gerichteten Transport von Protonen entgegen dem Konzentrationsgefälle bewirkt. Dadurch wird ein sog. chemiosmotisches Potential über die Chloroplastenmembran aufgebaut, das von der sog. ATP-Synthase genutzt werden kann, um ATP zu synthetisieren, indem der Protonenfluß innerhalb des Enzyms entlang des Konzentrationsgradienten zu einer Konformationsänderung der ATP-Synthase führt, die die Energie für die Synthese von Adenosintriphosphat (ATP) aus Adenosindiphosphat (ADP) und anorganischem Phosphat liefert.

Analog werden in der sog. Atmungskette in den Mitochondrien der Zelle Elektronen, die von Nicotinadenosindinucleotidphosphat (NADP) aus dem Krebszyklus geliefert werden, über verschiedene Membranprotein-Komplexe letztendlich über das Elektronentransportprotein Cytochrom c an die Cytochrom-c-oxidase weitergeleitet, wo sie mit Sauerstoff und Protonen zu Wasser

rekombinieren. Dabei werden, wie in der Photosynthese, Protonen entgegen dem Konzentrationsgradienten über die Mitochondrienmembran hinweg transportiert, so daß wieder ein Chemiosmotisches Potential entsteht, das von einer ATP-Synthase zur Synthese von ATP benutzt werden kann.

In allen diesen Elektronentransportprozessen handelt es sich um Tunnelprozesse, da die verschiedenen Kofaktoren in den Proteinkomplexen weit voneinander entfernt in die Matrix des Proteins eingebettet sind. Die einfachsten theoretischen Modelle, die nach dem Einfluß dieser dazwischenliegenden Proteinteile auf die Elektronentransferrate fragen, behandeln das Protein als strukturloses Medium und sagen eine einfache exponentielle Abhängigkeit der Elektronentransferrate vom Abstand voraus. Andererseits hat ein Protein klarerweise eine spezifische räumliche Struktur, und es erhebt sich die Frage, ob bestimmte Teile dieser Struktur bzw. sogar einzelne Aminosäurereste den Elektronentransport ermöglichen oder gar lenken. Bestimmte, evolutionär konservierte Aminosäurereste im Cytochrom c haben immer wieder diesbezügliche Spekulationen ausgelöst [128]. Kuki und Wolynes [129] haben deshalb eine Pfadintegralrechnung für ein von den Experimentalisten untersuchtes Modellsystem - nämlich das penta-aminoruthenium modifizierte Zinkmyoglobin - vorgenommen. Dabei dient der Porphyrinring mit einem Zinkatom als Zentralatom als Elektronendonator (D) und das fünffach Aminokoordinierte Ruthenium an der Außenseite des Proteins als Elektronenakzeptor (A). In der Born-Oppenheimer-Näherung findet die Bewegung der Atomkerne auf einer elektronischen Energiefläche statt, die entweder der neutralen Konfiguration DA oder der ionischen D^+A^- entspricht. Wäre kein Elektrontunneln möglich, wären die beiden elektronischen Zustände entkoppelt. Das Tunneln koppelt die beiden Zustände durch das sog. Tunnelmatrixelement Δ , das die Wahrscheinlichkeit für Übergänge zwischen den Energie-(hyper)flächen für feste Kernkonfiguration(-en) angibt. Wenn man die Kernbewegung als der klassischen Mechanik folgend annimmt, ist die kritische Konfiguration für den Übergangsprozeß an der Stelle, wo sich die beiden Potentialenergieflächen kreuzen. Nur in der Umgebung dieser Kreuzungsfläche ist die Resonanzbedingung erfüllt, und das Elektron kann springen. (Für kleine Δ ist die Wahrscheinlichkeit, daß das Elektron springt, proportional Δ^2 .) Dieses *surface hopping*-Bild macht klar, daß dasjenige Δ entscheidend für die Übergangsrate des Elektrons ist, das an der Kernkonfiguration ausgewertet wird, wo DA bzw. D^+A^- isoenergetisch sind. Dies ermöglicht die Bestimmung von Δ durch die Pfadintegralmethode.

Obwohl das Elektrontunneln ein dynamischer Prozeß ist, kann man die energetischen Konsequenzen auch in imaginärer Zeit berechnen. Der Tunnelprozeß bewirkt ein Aufspalten der adiabatischen Potential-Energieflächen, so daß sie in Wirklichkeit nicht mehr entartet sind, wie in der obigen Diskussion angenommen wurde. Diese Aufspaltung beträgt 2Δ am Kreuzungspunkt der Hyperflächen nullter Näherung. Δ kann man bestimmen durch Untersuchung des nichtdiagonalen Elements der thermalen Dichtematrix für das Elektron am Kreuzungspunkt zwischen zwei Zuständen 1 und 2. In imaginärer Zeit ergibt sich $G_{12} = \langle 1 | e^{-\beta H} | 2 \rangle$, wobei β die imaginäre Zeit bzw. die inverse thermische Energie darstellt, wenn man die thermodynamische Sprechweise wählt. Der obige Propagator kann als Pfadintegral dargestellt werden:

$$\langle 1 | e^{-\beta H} | 2 \rangle = \int dx_i \psi_1(x_i) \int dx_f \psi_2(x_f) \int \mathcal{D}x(\beta) \exp\left\{-\int_0^\beta H(x(\beta')) d\beta'\right\}, \quad (3-183)$$

wobei

$$H(x(\beta)) = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\beta}\right)^2 + V(x(\beta)) \quad (3-184)$$

und $V(x)$ das Potential ist, in dem sich das Elektron auf dem Pfad $x(\beta')$ bewegt. x_i und x_f sind die Koordinaten für die Anfangs- und Endzustände, und m ist die Elektronenmasse. Das Integral $\int_0^\beta H(x(\beta')) d\beta'$ ist die Wirkung in imaginärer Zeit. $V(x)$ besteht aus der Summe aller

Pseudopotentiale, die die Bewegung des Elektrons in der Umgebung jedes Atoms des Proteins beschreiben, und zwei Potentialtöpfen, die das Elektron beschreiben, wenn es am Donator oder Akzeptor gebunden ist. ψ_1 ist eine Wellenfunktion, die am Donor und ψ_2 eine, die am Akzeptor lokalisiert ist. Die genaue Form der Wellenfunktionen ist nicht wichtig, solange nur der Überlapp mit den wahren Wellenfunktionen groß genug ist. Die diskretisierte Form des Pfadintegrals mit 800 Zeitscheiben wird mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode ausgewertet. Für genügend große β ist in der 'Ein-Instanton-Näherung' der Zusammenhang zwischen der Tunnelamplitude und der Freien Energie eines Tunnelereignisses (eines 'Instantons') F_I gegeben durch:

$$\Delta = (1/\beta)e^{-\beta F_I} . \quad (3-185)$$

Für die Konstruktion der Pseudopotentiale der 1217 Nicht-Wasserstoffatome des Myoglobins und der detaillierten Methode zur Auswertung der Freien Energie eines Tunnelereignisses sei auf die Originalarbeit verwiesen. Dort finden sich auch Bilder, die die Tunnelpfade des Elektrons im Molekül zeigen. Da in letzter Zeit immer mehr Proteinstrukturen der Atmungskette bzw. des Photosynthesapparats mit Hilfe der Röntgenstrukturanalyse aufgelöst werden konnten, sollte die eben beschriebene Methode noch viele Anwendungsmöglichkeiten finden.

Einbeziehung von Nullpunktsfluktuationen

Ein weiteres Beispiel für die Anwendung der Pfadintegral-Methode ist die Berechnung der Nullpunktsfluktuationen von Atomen. Diese sind in der Physik der kondensierten Materie und der Chemie natürlich insbesondere bei leichten Atomen wie dem Wasserstoff von Belang. Jüngst wurde die Struktur des hyperkoordinierten Carbonium Ions, das man durch Behandlung gesättigter Kohlenwasserstoffe mit Supersäuren erhält, untersucht. Die Frage war, ob die fünf C-H Bindungen im protonierten Methan CH_5^+ , als einfachstem Vertreter dieser Stoffklasse, alle effektiv äquivalent sind, weil sie in schnellem dynamischen Austausch stehen, so daß das CH_5^+ ein sehr flexibles Molekül ohne feste Struktur wäre, oder ob das nicht-klassische Carbokation Bindungen enthält, in denen zwei Elektronen sich im Einflußbereich von drei Atomkernen aufhalten, sog. drei-Zentren-zwei-Elektron-Bindungen. Im letzteren Fall würde das Molekül eine trigonale Pyramide mit drei "normalen" C-H Bindungen und dem Kohlenstoffatom an der Spitze bilden, über dem ein gestrecktes H_2 -Molekül säße, das die Drei-Zentren-Bindung mit dem Kohlenstoff ausbilden würde. Da direkte experimentelle Bestimmungen der Struktur des Moleküls bisher erfolglos waren, wandten Marx und Parinello [131] eine Kombination aus der Dichtefunktionaltheorie zur Berechnung der Elektronenkonfiguration und der Pfadintegral-Methode für die Berechnung der Atomkerndynamik auf das Problem an. Das Pfadintegral für die sechs Kerne wurde mit 32 Zeitscheiben diskretisiert. Da periodische Randbedingungen in der imaginären Zeit gewählt wurden, ergab sich eine endliche Temperatur von fünf Kelvin für die dem Pfadintegral äquivalente Zustandssumme. Das internukleare Potential wurde mit einer korrigierten lokalen Dichtefunktionalmethode berechnet. Der Vergleich der Erwartungswerte für die radialen Verteilungsfunktionen mit Ergebnissen klassischer Berechnungen zeigt den ausgeprägten Effekt der quantenmechanischen Nullpunktsfluktuationen in einer starken Verbreiterung der Verteilung der C-H Bindungslängen, verglichen mit der klassischen Verteilung bei gleicher Temperatur. Die Grundzustandsverteilung der H-H Distanzen ist signifikant verbreitert durch die Quantenfluktuationen. Dies ermöglicht quantenmechanisches Tunneln zwischen verschiedenen Konfigurationen. Andererseits ergibt die Analyse der erzeugten Konfigurationen, daß das Molekül in 80% der Zeit in der trigonalen Form mit einer drei-Zentren-Bindung vorliegt. Dafür spricht auch, daß der Gipfel in der H-H Bindungsverteilungsfunktion einem gestreckten H_2 -Molekül zugeordnet werden

kann. Man findet also, daß trotz ausgeprägter quantenmechanischer Effekte der Grundzustand durch eine Struktur dominiert wird, in der eine H_2 -Einheit an eine CH_3 -Gruppe gebunden ist und eine drei-Zentren Bindung ausbildet. Insofern ähnelt CH_5^+ also anderen Carbokationen. Die eben beschriebene Methode läßt sich sicher auf andere Systeme übertragen, bei denen intramolekulare Quanteneffekte wie z. B. Quantentunneln von Protonen wichtig werden, oder deren Aktivierungsenergien für eine Isomerie-verändernde Reaktion klein sind [133]. Für solche sich leicht verformenden Moleküle könnte das Quantentunneln zwischen verschiedenen Strukturen erheblichen Einfluß auf ihre Eigenschaften haben. Nicht zu vernachlässigende Effekte könnten sich auch bei der Berechnung von Aktivierungsenergien für chemische Reaktionen ergeben, da die Reaktionsraten empfindlich von der Höhe der Freien-Energie-Barriere abhängen können.

Vielteilchenprobleme in der Quantenmechanik

Die Tatsache, daß die Gesamtwellenfunktion eines fermionischen Systems antisymmetrisch sein, daher Knotenflächen aufweisen muß, und die Wellenfunktion nicht positiv semidefinit sein kann, bewirkt das Auftauchen des sog. Fermionenproblems in der Pfadintegral-Monte-Carlo-Methode, da diese darauf beruht, das Maß $\mathcal{D}x e^{-S(x)}$ als Wahrscheinlichkeitsverteilung zu betrachten, die mittels eines Markovprozesses die Wahrscheinlichkeit der Erzeugung der einzelnen Konfigurationen $x(t)$ steuert. Deshalb findet die PIMC-Methode vor allen Dingen Verwendung, wenn es effektiv nur um ein Fermion geht, oder wenn das System aus Bosonen besteht. Viele Atome und Moleküle sind Bosonen. Die Gesamtwellenfunktion eines Clusters aus (Edel-)Gasatomen oder Molekülen oder von Molekülen in einem periodischen Volumen, die eine unendlich ausge dehnte Flüssigkeit repräsentieren sollen, ist dann total symmetrisch, wäre also geeignet für die PIMC-Methode. Allerdings sind die meisten Atome und Moleküle so schwer, daß Quanteneffekte nur bei sehr niedrigen Temperaturen oder gar keine Rolle spielen. Dies bedingt in der PIMC-Methode eine riesige Ausdehnung des Zeitgitters und damit eine entsprechende Rechen- und Speicherleistung. Daher verwendet man zur Simulation von Flüssigkeiten, bei denen sowieso nur der Grundzustand interessiert, die Diffusions MC-Methode [99].

Die wichtigsten Ausnahmen von dieser Regel sind Systeme aus den verschiedenen Isotopen von Wasserstoff und Helium. Insbesondere die Supraflüssigkeit des Heliums und die damit zusammenhängenden Effekte eignen sich gut für eine Berechnung mit der Pfadintegralmethode. Einen ausführlichen Überblick gibt Ceperly in [102]. Bei der Herleitung der Zustandssumme für ein System von Bosonen muß man berücksichtigen, daß die Teilchen ununterscheidbar sind. Nur total symmetrische Eigenfunktionen $\Phi_i(R)$ tragen zur Dichtematrix bzw. Übergangsamplitude bei, so daß $\Phi_i(PR) = \Phi_i(R)$, wobei P eine Permutation der Teilchenindizes ist, d.h. $PR = (r_{P1}, r_{P2}, \dots, r_{PN})$. Sei $\mathcal{P}\Phi(R) = \frac{1}{N!} \sum_P \Phi(PR)$ der Teilchensymmetrisierungsoperator. Wenn der Hamiltonian symmetrisch unter Teilchenvertauschung ist, sind alle Zustände entweder gerade oder ungerade in bezug auf eine gegebene Permutation. \mathcal{P} projiziert dann die Zustände heraus, die der Bose-Statistik genügen. Wenn man \mathcal{P} auf die Dichtematrix bzw. Übergangsamplitude in euklidischer Zeit anwendet, erhält man die bosonische Dichtematrix

$$\rho_B(R_0, R_1; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \rho(R_0, PR_1; \beta), \quad (3-186)$$

wobei ρ_b die bosonische und ρ die der Boltzmann-Statistik gehorchende Dichtematrix sind. Man kann P auf das erste Argument von ρ , das zweite Argument oder auf beide anwenden. Das Ergebnis ist immer das gleiche.

Für große Teilchenzahl N ist eine direkte Auswertung der Permutationssumme natürlich nicht

möglich, da sie $N!$ Terme enthält. Da aber alle Terme der Summe positiv sind, kann man die Summe durch eine Monte-Carlo-Summation bestimmen, d.h. eine bosonische Simulation besteht aus einem *random walk* im Pfadraum und dem 'Permutationsraum'. Die den einzelnen Teilchen zugeordneten Pfade haben jetzt nicht mehr einfache periodische Randbedingungen, sondern können miteinander vernetzt sein. Bei hohen Temperaturen dominiert die Einheitspermutation, d.h. die einzelnen Teilchenpfade bleiben getrennt, aber bei niedrigen tragen alle Permutationen bei, und die Pfade der Teilchen in imaginärer Zeit sind nicht mehr getrennt. Wenn die Vernetzung das gesamte Volumen erfaßt hat, ist der supraflüssige Zustand realisiert.

Für Helium 4 konnten mit Hilfe der Monte-Carlo-Pfadintegralmethode nicht nur die kritische Temperatur für den Übergang in die supraflüssige Phase bestimmt werden, sondern auch die spezifische Wärme, die Paarkorrelationsfunktion und die Strukturfunktion, die Kondensatfraktion und Verunreinigungen durch einzelne Fremdatome in flüssigem Helium. Die Übereinstimmung mit dem Experiment ist gewöhnlich sehr gut.

Kapitel 4

SU(2) und SU(3) im kleinen Volumen

Dieses Kapitel beschreibt die Berechnung des Spektrums des effektiven Hamiltonians bzw. der effektiven Lagrange-Funktion für die räumlich konstanten Moden des Eichfelds in einem kleinen Volumen mit Torustopologie mit Hilfe des Metropolis-Monte-Carlo-Algorithmus auf einem Zeitgitter. Die Motivation dafür wurde in der Einleitung erklärt, und ein kurzer Abriss der historischen Entwicklung der Problemstellung und der von vielen Autoren erzielten Ergebnisse wurde in Kapitel 1 gegeben. Die Grundlagen der numerischen Berechnung wurden in Kapitel 3 jeweils in den entsprechenden Unterkapiteln kurz erläutert. Im folgenden beziehen sich die Sektionsangaben hinter den Stichwörtern immer auf Kapitel 3.

4.1 Der effektive Hamilton-Operator

Durch Ausintegrieren der räumlich nicht-konstanten Feldmoden erhielt Lüscher [20] einen effektiven Hamilton-Operator für die räumlich konstanten Moden. Zusammen mit Münster berechnete er auch das Spektrum für kleine Toruslängen L mittels der Raleigh-Ritz-Variationsmethode (5.1) [21]. Eine analoge Rechnung wurde von Weisz und Ziemann [10] und Vohwinkel [8, 9] für SU(3) durchgeführt. Die für die in diesem Kapitel beschriebenen Berechnungen benutzte Form des effektiven Hamiltonians bzw. des entsprechenden Lagrangians sei hier noch einmal kurz aufgeführt. Für die Rechnungen im kleinen Volumenbereich wurden nur Terme bis zur vierten Ordnung in c_i^a benutzt.

4.1.1 SU(2)

Im Fall der SU(2)-Eichgruppe wird hier der effektive Hamilton-Operator gleich mit der von van Baal vorgenommenen Einbeziehung von n_f masselosen Fermionen – d. h. Quarkspezies gezeigt – [30]. Man kann deren Einfluß berücksichtigen, indem man wieder durch Ein-Schleifen-Integration ein effektives Potential für die räumlich konstanten Eichfeldmoden berechnet. Bei Annahme von antiperiodischen Randbedingungen für die Fermionen ergibt sich wieder ein effektives Potential von gleicher Form wie bei der Ausintegration der nicht-konstanten Feldmoden. Die Koeffizienten vor den einzelnen Termen des effektiven Potentials werden also nur einen von den Fermionen

stammenden zusätzlichen Beitrag erhalten, der umso stärker ist, je mehr Fermionenspezies n_f beitragen.

$$\begin{aligned} L \cdot H_{eff} &= g^{2/3} H_0 + g^{4/3} \tilde{\kappa}_1 c_i^a c_i^a + g^{8/3} (\tilde{\kappa}_2 + \frac{8}{3} (\tilde{\kappa}_4 - \tilde{\kappa}_3)) H_0 \\ &\quad + 3g^{8/3} (\tilde{\kappa}_3 - \tilde{\kappa}_4) c_i^a c_i^a c_j^b c_j^b + 5g^{8/3} \tilde{\kappa}_4 c_i^a c_i^a c_i^b c_i^b, \\ H_0 &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial c_i^a{}^2} + \frac{1}{4} F_{ij}^a F_{ij}^a. \end{aligned} \quad (4-1)$$

Dabei ist $\tilde{\kappa}_i = \kappa_i - 2n_f \kappa_i'$ und

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= -3.0104661 \cdot 10^{-1}, \quad \kappa_1' = -2.1272012 \cdot 10^{-2}, \\ \kappa_2 &= -6.3319840 \cdot 10^{-3}, \quad \kappa_2' = 2.2421241 \cdot 10^{-4}, \\ \kappa_3 &= +5.6289546 \cdot 10^{-4}, \quad \kappa_3' = +3.5180967 \cdot 10^{-5}, \\ \kappa_4 &= -1.5687855 \cdot 10^{-3}, \quad \kappa_4' = +1.5850480 \cdot 10^{-4}. \end{aligned} \quad (4-2)$$

Lüscher und Münster [21] konnten ihre mit der Variationsmethode und Störungstheorie gewonnenen approximativen Energieeigenwerte als Potenzreihe in $g^{2/3}$ angeben. Dadurch, daß die Koeffizienten im effektiven Hamilton-Operator von n_f abhängen, werden auch die Entwicklungskoeffizienten $\epsilon_i, i \in \{1, 2, 3, \dots\}$, von n_f abhängig und zwar über $\rho = \tilde{\kappa}_1/\kappa_1 = (1 - 0.14132n_f)$:

$$L \cdot E = g^{2/3} \tilde{\epsilon}_1 + g^{4/3} \tilde{\epsilon}_2 + g^2 \tilde{\epsilon}_3 + g^{8/3} \tilde{\epsilon}_4 + O(g^{10/3}). \quad (4-3)$$

Dabei ist $\tilde{\epsilon}_1 = \epsilon_1$, $\tilde{\epsilon}_2 = \rho \epsilon_2$, $\tilde{\epsilon}_3 = \rho^2 \epsilon_3$, während der Zusammenhang zwischen $\tilde{\epsilon}_4$ und ϵ_4 komplizierter ist. Da ϵ_4 aber sehr klein ist, soll die Reihe nur bis zur dritten Ordnung betrachtet werden. Außerdem sieht man, daß für die ersten drei Ordnungen der Störungsreihe ein einfaches Skalierungsverhalten für die Energien gilt:

$$L \cdot E(n_f, g) = \rho^{-1} L \cdot E(0, \rho^{3/2} g). \quad (4-4)$$

Daraus kann dann für die Massenverhältnisse bzw. z-Variablenverhältnisse $r_R = m_R/m_E^\dagger = z_R/z_E^\dagger$ abgeleitet werden, daß sie mit $z_E^\dagger = m_E^\dagger \cdot L$ im Rahmen der oben gemachten Näherung skalieren wie:

$$r_R(n_f, z_E^\dagger) = r_R(0, \rho z_E^\dagger). \quad (4-5)$$

4.1.2 SU(3)

Die der von Lüscher hergeleiteten effektiven Hamilton-Funktion bzw. dem Hamilton-Operator entsprechende Lagrange-Funktion hat die folgende Form:

$$\begin{aligned} L_{eff} &= g^{\frac{2}{3}} (1 + g^2 a_2) \left(\frac{1}{2} c_i^a c_i^a + \frac{1}{4} f^{abe} f^{ecd} c_i^a c_j^b c_i^c c_j^d \right) \\ &\quad + g^{\frac{4}{3}} a_1 c_i^a c_i^a + g^{\frac{8}{3}} (a_3 s^{abcd} c_i^a c_i^b c_j^c c_j^d + a_4 s^{abcd} c_i^a c_i^b c_i^c c_i^d). \end{aligned} \quad (4-6)$$

Die a-Koeffizienten sind:

$$\begin{aligned} a_1 &= -3.0104661 \cdot 10^{-1}, \\ a_2 &= -9.4979760 \cdot 10^{-3}, \\ a_3 &= +3.1975214 \cdot 10^{-3}, \\ a_4 &= -3.9219638 \cdot 10^{-3}. \end{aligned} \quad (4-7)$$

Dabei ist s^{abcd} der total symmetrische Tensor, der im Fall der Eichgruppe SU(3) sehr einfach geschrieben werden kann:

$$s^{abcd} = \frac{3}{4}(\delta^{ab}\delta^{cd} + \delta^{ac}\delta^{bd} + \delta^{ad}\delta^{bc}). \quad (4-8)$$

Wenn man antisymmetrische Randbedingungen für die Fermionen fordert, bleibt die obige Form der effektiven Langrange-Funktion erhalten. Es müssen nur folgende Ersetzungen vorgenommen werden, um den Einfluß der Fermionen zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned} a_1 &\rightarrow a_1 - 2n_f\kappa'_1, \\ a_3 &\rightarrow a_3 - \frac{8}{3}n_f(\kappa'_3 - \kappa'_4), \\ a_4 &\rightarrow a_4 - \frac{40}{3}n_f\kappa'_4. \end{aligned} \quad (4-9)$$

Wenn man wieder nur die ersten drei Ordnungen der Reihenentwicklung der Energien berücksichtigt, ergeben sich wieder die Skalierungsformeln (4-4) und (4-5), aber mit einem anderen ρ [30]:

$$\rho = (3\kappa_1 - 4n_f\kappa'_1)/(3\kappa_1) = (1 - 0.09421n_f). \quad (4-10)$$

Also $\rho = 0.71737$ für $n_f = 3$.

4.2 Methodische Details

Da die Rotationssymmetrie des Systems durch die Torustopologie gebrochen wird, enthält der effektive Lagrangian einen Term (der letzte in Formel (1.1)), der die O(3)-Symmetrie bricht. Die verbleibende Symmetrie ist die der Oktaedergruppe, und deshalb werden die zu messenden Zustände als irreduzible Darstellungen (irreps) dieser Gruppe konstruiert. Zusätzliche Symmetrien sind Parität P and Ladungskonjugation C. Letztere ist allerdings nur für SU(3) nichttrivial. Tabelle 1 zeigt die Meßoperatoren für jeden Zustand. (Über wiederholte Indizes ist zu summieren.)

Um das Spektrum zu berechnen, wurde die Metropolis-Monte-Carlo-Methode benutzt (5.1.4) [31, 32] (und Literatur darin). Diese läßt sich einfach vektorisieren. Nach jedem zwanzigsten *sweep* im Fall von SU(2) bzw. nach jedem fünfzehnten im Fall von SU(3) wurden die Korrelationsfunktionen der verschiedenen Darstellungen der *glueball*-Zustände 'gemessen'. Die Vektor- und Tensorzustandsoperatoren wurden für alle möglichen Raumrichtungen konstruiert (5.1.8). Die Erwartungswerte der Korrelationsfunktionen wurden daraufhin überprüft, ob sie invariant gegen alle Permutationen der Koordinatenachsen waren, und, falls das der Fall war, gemittelt. Zur Bestimmung des *mass gaps* aus den Korrelationsfunktionen siehe [32, 33] und (5.1.7).

Im Fall von SU(2) wurden die Daten in 128 *bins* á 250 Messungen zusammengefaßt [32]. Die Zahl der Thermalisationssweeps (5.2.3) entspricht 16 *bins*. Die Fehlerbalken wurden berechnet, indem man die Daten in jeweils 128, 64, 32 und 16 *bins* zusammenfaßte und den statistischen Fehler aus den *bin*-Mittelwerten als Daten bestimmte (5.2.4). Es wurde der jeweils größte Fehler angegeben. Die meisten Datenpunkte wurden mit einer Zeitschrittweite von 0.2 auf einem Zeitgitter von 400 Punkten berechnet. Bei den höchsten *g*-Werten wurden auch Zeitschritte von 0.15 und 0.10 verwendet, um die Ergebnisse auf systematische Fehler, verursacht durch die endliche Zeitschrittweite, zu überprüfen (5.2.1). Dabei wurde die Gesamtlänge des Zeitgitters jeweils konstant gehalten, d. h. $T = N_T \cdot \epsilon = const. = 80$.

$irrep^{PC}$	Notation aus [40, 10]	explizit
E_2^{++}		$c_1^a c_1^a - c_2^a c_2^a$ und zyklisch; $c_1^a c_1^a + c_2^a c_2^a - 2c_3^a c_3^a$ und zyklisch
T_2^{++}	(ij)	$c_i^a c_j^a$; $i \neq j$
A_1^{++}	(ii)	$c_i^a c_i^a$
A_1^{-+}	$Im(\epsilon_{ijk}(ijk))$	$\epsilon_{ijk} f^{abc} c_i^a c_j^b c_k^c$
A_1^{+-}	$Im((ij)(kll)(ijkmm))$	$(c_i^f c_j^f)(c_i^a c_j^b d^{abp} f^{pcg} c_k^c (d^{qrs} c_k^q c_l^r c_l^s) d^{gde} c_m^d c_m^e)$
T_2^{-+}	$Im(\epsilon_{klm}(klm)(ij))$	$(\epsilon_{klm} f^{abc} c_k^a c_l^b c_m^c) c_i^d c_j^d$
T_2^{+-}	$Im((ik)(jkl))$	$(c_i^f c_k^f)(c_j^a c_k^b f^{abe} d^{ecd} c_m^c c_m^d)$
T_1^{++}	$Re((jl)(lkmm)\epsilon_{ijk})$	$(c_j^f c_l^f)(c_i^a c_k^b d^{abe} d^{ecd} c_m^c c_m^d) \epsilon_{ijk}$
T_1^{-+}	$Im((jkk)(ijll))$	$(d^{fgh} c_j^f c_k^g c_k^h)(c_i^a c_j^b f^{abe} d^{ecd} c_m^c c_m^d)$
T_1^{+-}	$Im(\epsilon_{ijk}(jkl))$	$-\epsilon_{ijk} (c_j^a c_k^b f^{abe} d^{ecd} c_l^c c_l^d)$
T_1^{--}	(ijj)	$d^{abc} c_i^a c_j^b c_j^c$
A_2^{--}	(ijk)	$d^{abc} c_i^a c_j^b c_k^c$

Tabelle 4.1: In den Korrelationsfunktionen verwendete Operatoren für die verschiedenen irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe unterschiedlicher Parität und C-Parität

Für SU(3) wurden die Daten in 400 *bins* á 40 Messungen zusammengefaßt. Die Zahl der Thermalisationssweeps entspricht 24 *bins*. Die statistischen Fehler der z -Werte und der Massenverhältnisse wurden mit der *jack-knife*-Methode (5.2.6) berechnet [41] (und Literatur darin) für 400, 200, ..., 25 *bins*. Falls mit zunehmender *bin*-Größe sich kein Plateau im statistischen Fehler einstellt, wird der größte Fehler angegeben. Die Ergebnisse, die in Tabelle 2 für den Fall der reinen SU(3) Eichtheorie dargestellt sind, wurden alle mit einem Zeitschritt von 0.15 auf einem periodischen Zeitgitter mit 320 'Zeitscheiben' erhalten. Eine Vergrößerung des Zeitschritts auf 0.2 bewirkt keine Abweichungen im Rahmen des statistischen Fehlers. Dieser ist allerdings größer als im Fall von SU(2), da die Zahl der Daten geringer ist infolge begrenzter zur Verfügung stehender Rechenzeit. (Die Produktion eines *bin* benötigte 150 Sekunden auf einer IBM 3090.) Für g -Werte kleiner als 0.1 wird die MC-Methode allerdings zunehmend rechenzeitintensiver, da der *mass gap* mit verschwindenden g ebenfalls gegen Null geht.

Da für $g \rightarrow 0$ die Terme niedrigster Ordnung (der klassische Lagrangian) dominieren, sind die *mass gaps* proportional $g^{\frac{2}{3}}$ und daher die Massenverhältnisse unabhängig von g . Man kann deshalb die Massenverhältnisse für $g = 0$ bestimmen, indem man alle Terme höherer Ordnung im effektiven Lagrangian wegläßt und die Simulation für ein geeignet gewähltes g durchführt. Da die Kurven für die Massenverhältnisse in der Nähe von $z = 0$ sehr flach verlaufen, kann man die z -Werte, die man nicht messen kann, durch Interpolation erhalten.

4.3 Resultate und Diskussion

4.3.1 SU(2)

Für diese Gruppe wurde die Monte-Carlo-Methode zur Bestimmung des Spektrums (bzw. der *mass gaps*) zuerst von Kripfganz and Michael [31, 32] benutzt, und die Reproduktion ihrer Resultate dient hier nur dazu, die Genauigkeit der Methode zu illustrieren. Die Bilder 1 und 2,

die auch schon in [37] zur Illustration verwendet wurden, zeigen eine recht gute Übereinstimmung zwischen der Monte-Carlo- und der Variationsmethode – wie auch in [32] berichtet wurde.

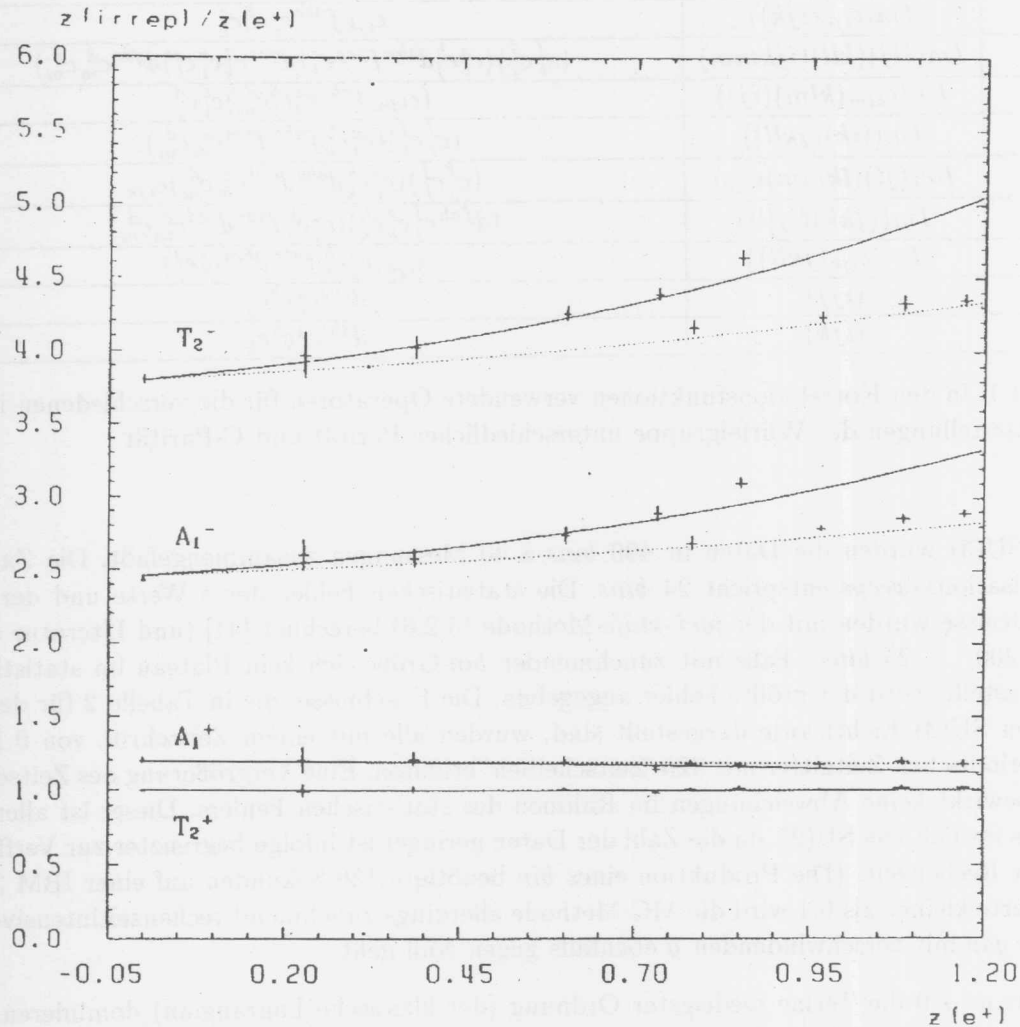


Abbildung 4.1: Massenverhältnisse für die Eichgruppe $SU(2)$

Die durchgezogene Linie zeigt die Ergebnisse von Lüscher und Münster [21], und die gepunktete Linie erhält man, wenn man zusätzlich drei Spezies von masselosen Fermionen im effektiven Lagrangian berücksichtigt. Die Ergebnisse der Variationsmethode lassen sich dann näherungsweise umskalieren, wie von van Baal erläutert [30]. Im Fall von $SU(2)$ beobachtet man allerdings einen deutlich sichtbaren systematischen Fehler für große z_{E^+} , verursacht durch den endlichen Zeitschritt, da die Massenverhältnisse für A_1^- und T_2^- kleiner werden, wenn man vom Zeitschritt 0.2 über 0.15 zu einem Zeitschritt von 0.1 übergeht. (Die physikalische Länge des Zeitgitters wird jeweils konstant gehalten.) Diese Verringerung der Massenverhältnisse wird hauptsächlich bewirkt durch eine Vergrößerung von z_{E^+} um etwa ein Prozent für jede Verringerung des Zeitschritts um 0.05. Dagegen sind die Zuwächse der z -Werte für T_2^+ und A_1^+ etwas kleiner, und $z_{T_2^-}$ zeigt überhaupt keine Zeitschrittabhängigkeit. Der $z_{A_1^+}$ -Wert ändert sich um drei bis fünf

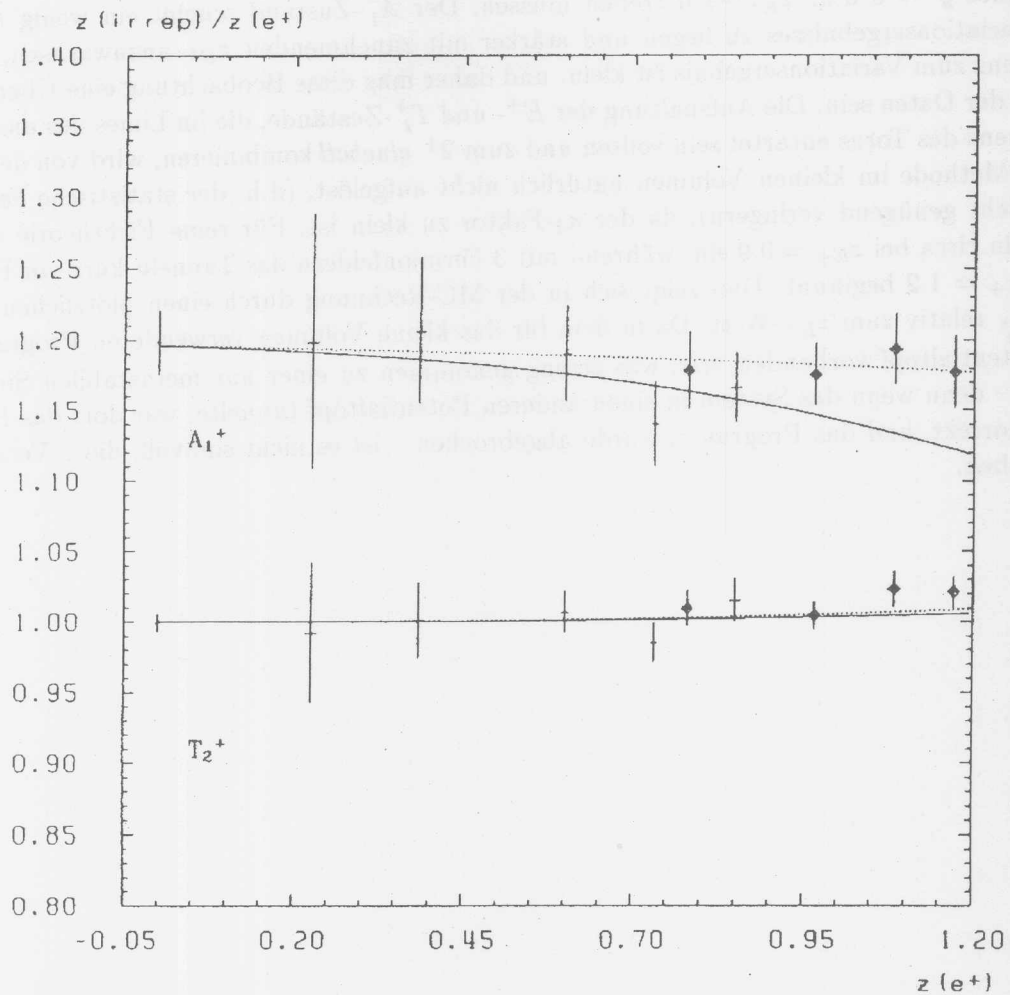


Abbildung 4.2: Massenverhältnisse für die Eichgruppe SU(2) – Vergrößerung des obigen Bildes

Prozent, wenn man vom Zeitschritt 0.2 zu einem von 0.1 übergeht, aber der statistische Fehler ist in diesem Fall auch größer. Es sieht also so aus, als könnte man keinen Plateauwert für die jeweilige Masse erreichen, indem man den Zeitschritt verringert, und obwohl es möglich ist, daß die verbleibenden Abweichungen der Datenpunkte von den Kurven in Bild 1 verschwinden, wenn man zu noch kleineren Zeitschritten ginge, so ist dies doch praktisch nicht erreichbar, da die Autokorrelationszeit mit immer kleiner werdendem Zeitschritt anwächst. Mit dem hier erreichten Wert des statistischen Fehlers läßt sich der Unterschied zwischen den Kurven mit und ohne Fermionen mit der Monte-Carlo-Methode nicht auflösen, wenn z_{E^+} kleiner als 0.5 ist im Fall der A_1^- und T_2^- -Zustände und für z_{E^+} kleiner als 0.75 im Fall des A_1^+ -Zustands. Da der effektive Hamiltonian in niedrigster Ordnung mit $g^{\frac{2}{3}}$ skaliert, sind die Massenverhältnisse unabhängig von g und daher in dieser Ordnung auch unabhängig von z_{E^+} . Der Term des effektiven Lagrangian, der die Hauptabweichung der Massenverhältnisse von einem konstanten Wert für alle z_{E^+} bewirkt, ist κ_1 , da die κ_3 - und κ_4 -Faktoren eine bzw. zwei Größenordnungen kleiner sind. Da κ_1

durch den fermionischen Beitrag im Betrag von ca. 0.3 auf ca. 0.17 reduziert wird, ist es offensichtlich, daß die Massenverhältnißkurven flacher werden und die Kurven für reine Eichtheorie im Limes $g \rightarrow 0$ d.h. $z_{E^+} \rightarrow 0$ treffen müssen. Der A_1^- -Zustand scheint ein wenig unterhalb des Variationsergebnisses zu liegen und stärker mit zunehmenden z_{E^+} anzuwachsen, aber die Differenz zum Variationsergebnis ist klein, und daher mag diese Beobachtung eine Überinterpretation der Daten sein. Die Aufspaltung der E^+ - und T_2^+ -Zustände, die im Limes des unendlichen Volumens des Torus entartet sein sollten und zum 2^+ *glueball* kombinieren, wird von der Monte-Carlo-Methode im kleinen Volumen natürlich nicht aufgelöst, (d.h. der statistische Fehler läßt sich nicht genügend verringern), da der κ_4 -Faktor zu klein ist. Für reine Eichtheorie setzt das Tunneln circa bei $z_{E^+} = 0.9$ ein, während mit 3 Fermionfeldern das Tunneln kurz vor Erreichen von $z_{E^+} = 1.2$ beginnt. Dies zeigt sich in der MC-Rechnung durch einen plötzlichen Anstieg des $z_{T_2^+}$ relativ zum z_{E^+} -Wert. Da in dem für das kleine Volumen verwendeten Programm nur ein Potentialtopf vorhanden war, was streng genommen zu einer nur metastabilen Simulation führte – denn wenn das System in einen anderen Potentialtopf tunnelte, war dort das Potential nicht korrekt, und das Programm wurde abgebrochen – ist es nicht sinnvoll, die z -Verhältnisse anzugeben.

4.3.2 SU(3)

Die folgende Tabelle zeigt die Resultate der Monte-Carlo-Rechnungen im Fall reiner Eichfelder, die Ergebnisse von Vohwinkel für den niedrigsten in [8] angegebenen g -Wert und außerdem die Massenverhältnisse, die Weisz und Ziemann in [40, 10] für $g = 0$ erhielten.

	$g^2 = 0$ [10]	' $g^2 = 0$ '	$g^2 = 0.01$	$g^2 = 0.05$	$g^2 = 0.16$	$g^2 = 0.16$ [8]
$z_{E^{++}}$	0	0	0.448(10)	0.715(9)	0.956(8)	0.993
$\frac{z_{E^{++}}}{z(\text{irrep}^{PC})}$						
T_2^{+++}	1.000	1.013(13)	1.006(27)	0.994(19)	0.990(13)	1.078
A_1^{+++}	1.230	1.25(2)	1.28(5)	1.25(11)	1.23(4)	1.309
A_1^{-+}	2.30	2.35(5)	2.45(5)	2.63(4)	2.78(4)	3.22
A_1^{+-}	6.80	5.49(14)	5.56(20)	5.61(16)	5.87(20)	6.45
T_2^{-+}	3.71	3.42(5)	3.63(10)	3.77(5)	3.98(8)	4.18
E^{-+}	3.71	3.45(5)	3.61(7)	3.76(6)	3.95(6)	
T_2^{+-}	4.20	4.05(7)	4.22(7)	4.39(6)	4.72(6)	4.94
E^{+-}	4.20	4.09(5)	4.22(7)	4.38(7)	4.68(7)	
T_1^{++}	> 3.3	3.99(6)	4.15(10)	4.42(9)	4.60(10)	3.28
T_1^{-+}	4.60	4.87(7)	4.99(10)	5.19(9)	5.33(16)	5.39
T_1^{+-}	2.39	2.72(5)	2.84(7)	2.93(6)	3.22(5)	3.48
T_1^{--}	1.97	1.82(3)	1.83(4)	1.86(4)	1.86(4)	1.90
A_2^{--}	1.73	1.55(2)	1.57(4)	1.57(3)	1.57(2)	1.67

Tabelle 4.2: Massenverhältnisse in Abhängigkeit von $z_{E^{++}}$ für verschiedene Werte der Koppelkonstanten g

Obwohl in [10] Massenverhältnisse für alle relevanten $z_{E^{++}}$ -Werte angegeben werden, werden hier nur die Werte für $g = 0$ zitiert, da ein Vergleich bei anderen g -Werten qualitativ die gleichen Ergebnisse liefern würde. Man findet gute Übereinstimmung für die E^{++} , T_2^{++} , A_1^{++} und A_1^{-+} -Zustände. Die Differenz zwischen der Monte-Carlo-Rechnung und dem Resultat der Variationsrechnung in [8] für E^{++} ist eine 4σ Abweichung und könnte entweder dadurch verursacht sein, daß in der Rechnung von Vohwinkel die Terme sechster Ordnung im effektiven Hamilton-Operator mitberücksichtigt wurden – da diese im mittleren Volumen bemerkbare Beiträge liefern – oder durch Effekte des endlich großen Basissatzes (obwohl von Vohwinkel als kleiner als zwei Prozent geschätzt) oder durch den systematischen Fehler durch den endlichen Zeitschritt in der Monte-Carlo-Rechnung. Da man für den skalaren A_1^{++} -Zustand die zusammenhängende Korrelationsfunktion zur Bestimmung des *mass gaps* berechnen, d.h. zwei statistisch fluktuierende Größen voneinander abziehen muß, ist der statistische Fehler für den *mass gap* ziemlich groß. Im Vergleich mit der Variationsmethode kann man also keinen Gewinn an Genauigkeit verbuchen. Andererseits liegen die *mass gaps* für die A_1^{+-} , T_2^{-+} , T_2^{+-} , E^{+-} , A_2^{--} und T_1^{--} -Zustände deutlich niedriger als die mit der Variationsmethode errechneten. Dies ist sicher ein Effekt des zu kleinen Basissatzes in den Rayleigh-Ritz-Rechnungen, da eine Änderung des Zeitschritts in der Monte-Carlo-Rechnung auf 0.2 keine Abweichung innerhalb des statistischen Fehlers erkennen läßt. Unglücklicherweise liefern die Korrelationsfunktionen für A_1^{--} , E^{--} und T_2^{--} keine Massenabschätzung, die es wert wäre zu Papier gebracht zu werden.

In Bezug auf die in der obigen Tabelle dargestellten Ergebnisse sind folgende Bemerkungen angebracht, wenn man mit den Ergebnissen der Variationsmethode vergleicht:

Der T_1 -Operator transformiert als eine irreduzible Darstellung der Würfelgruppe, die nicht nur in der Spin-1-Darstellung sondern auch in der Spin-3-(und höhere Spins)-Darstellung der Rotationsgruppe enthalten ist. Dies bedeutet, daß die T_2 - und A_2 - mit einer T_1 -Darstellung zu einer Spin-3-Darstellung kombinieren, wenn die Rotationsinvarianz ungebrochen ist. Also sollten der T_1^{--} - und der A_2^{--} -Zustand hinsichtlich der Masse entartet sein. Da aber der Term im Lagrangian, der die Rotationssymmetrie bricht, so klein ist, und der T_1^{--} -Operator so konstruiert ist, daß er ein Spin-1-Operator wäre, wenn die Rotationsinvarianz ungebrochen wäre, projiziert er wahrscheinlich beinahe ausschließlich auf den T_1^{--} -Zustand, der im Limes des unendlichen Volumens zum 1^{--} -Zustand gehört. So liefert nur die A_2^{--} -Korrelationsfunktion den *mass gap* des Spin-3⁻⁻-Zustands.

In ähnlicher Weise projiziert der T_1^{++} -Operator nicht auf den Zustand, der sich nach der irreduziblen Darstellung T_1^{++} transformiert, die zum Spin 4⁺⁺ gehört, den Vohwinkel als den Spinzustand mit der kleinsten Masse, der T_1^{++} enthält, identifizierte, sondern auf den Spin-1⁺⁺-Zustand. Leider stimmt der mit der Monte-Carlo-Methode bestimmte Wert nicht mit dem Massenwert überein, der in [8] für den nächsthöheren T_1^{++} gefunden wurde, der nicht zum 4⁺⁺ gehört.

Daß die Rotationssymmetrie im kleinen Volumen ungebrochen ist, zeigt sich auch durch die Entartung von T_2^{+-} und E^{+-} , die zum 2⁺⁻-Zustand gehören, genauso wie T_2^{-+} und E^{-+} , die zum 2⁻⁺-Zustand gehören.

Die leichte Abweichung des T_1^{-+} bei $g = 0$ im Vergleich mit dem Ergebnis der Variationsrechnung könnte vielleicht durch die Tatsache erklärt werden, daß ein angeregter Zustand auf der Massenskala in der Nähe liegt (bei 4.86, wenn man das Ergebnis von Vohwinkel linear nach $g = 0$ extrapoliert.) Dies könnte dazu führen, daß man eine effektive Masse mißt, die größer erscheint als der wirkliche *massgap*, da bei der Überlagerung der Exponentialabfälle der Term mit dem kleineren Exponenten sich erst durchsetzen kann, wenn das Signal der Korrelationsfunktion schon längst im statistischen Rauschen verschwunden ist. Siehe (5.2.2).

Wenn man die (wenigen) Datenpunkte dazu verwendet, jeweils eine Kurve zweiter Ordnung zu *fit*ten, erhält man mit der Routine 'Gnuplot' [134] folgende Koeffizienten für eine Potenzreihe $z(irrep)/z_E = r_0 + r_1 z_E + r_2 (z_E)^2$. Die Fehler in Klammern in der folgenden Tabelle geben nur die Fehler des *fits* an.

Die folgenden Bilder stellen die obigen Ergebnisse noch einmal in graphischer Form dar:

Der Effekt der Fermionen mit antiperiodischen Randbedingungen auf die Massenverhältnisse ist für SU(3) kleiner als für SU(2), da der bosonische Teil des κ_1 -Koeffizienten, der die Steigung der Massenverhältniskurven hauptsächlich bestimmt, proportional zu N ist im Fall von SU(N), wohingegen der fermionische Teil unabhängig von N ist. Daraus folgt, daß der Einfluß der Fermionen im Fall der SU(3) kleiner ist, als es bei der SU(2)-Theorie der Fall war. Aus der Skalierungsformel für die Energien (4. 10) bzw. Massenverhältnisse (4. 11) kann man trotzdem die Abhängigkeit der Massenverhältnisse von z_{E++} berechnen, da man durch einen *fit* an die ohne Fermionen erhaltenen 'Messpunkte' die entsprechenden r-Koeffizienten der Potenzreihe $z(irrep)/z_E$ erhalten kann, die dann mit den oben erwähnten Formeln nur umskaliert werden müssen, um die Massenverhältniskurven für den fermionischen Fall zu erhalten.

Da für SU(3) die Massenverhältniskurven in Abhängigkeit von z_{E++} ziemlich flach verlaufen, erwartet man im kleinen Volumenbereich also selbst mit drei masselosen Quarks nur einen sehr kleinen Effekt. Deshalb wurde darauf verzichtet, die Monte-Carlo-Berechnungen noch einmal mit einem um die fermionischen Anteile ergänzten Potential durchzuführen, da sehr lange

$\frac{z(\text{irrep}^{PC})}{z_{E^{++}}}$	r_0	$r_1(n_f = 0)$	$r_2(n_f = 0)$	$r_1(n_f = 3)$	$r_2(n_f = 3)$
T_2^{++}	1.01315(2)	-0.0217(2)	-0.0031(2)	-0.0156	-0.0016
A_1^{++}	1.25006(13)	0.1363(14)	-0.1652(15)	0.0978	-0.0850
A_1^{-+}	2.3460(7)	0.1142(31)	0.3626(31)	0.0819	0.1866
A_1^{+-}	5.4944(44)	-0.239(26)	0.635(29)	-0.1715	0.3268
T_2^{-+}	3.4212(7)	0.2691(43)	0.3213(50)	0.1930	0.1653
E^{-+}	3.4504(2)	0.1939(8)	0.3421(9)	0.1391	0.1761
T_2^{+-}	4.0554(13)	-0.0268(63)	0.7438(64)	-0.0192	0.3828
E^{+-}	4.0918(8)	-0.0694(46)	0.7062(50)	-0.0498	0.3634
T_1^{-+}	4.8680(14)	0.1470(94)	0.381(11)	0.1055	0.196
T_1^{+-}	2.7242(15)	-0.1369(83)	0.6734(87)	-0.0982	0.3465
T_1^{--}	1.8191(2)	0.0338(11)	0.0123(12)	0.0242	0.0063
A_2^{--}	1.55010(2)	0.0574(2)	-0.0385(2)	0.0412	-0.0198

Tabelle 4.3: Die durch einen *fit* erhalten Koeffizienten für eine Potenzreihenentwicklung der Massenverhältnisse in Abhängigkeit von $z_{E^{++}}$

Rechenzeiten erforderlich wären, um den statistischen Fehler soweit zu drücken, daß man eine Abweichung von den Resultaten der reinen Eichtheorie sicher auf den Einfluß des fermionischen Anteils des effektiven Potentials zurückführen könnte.

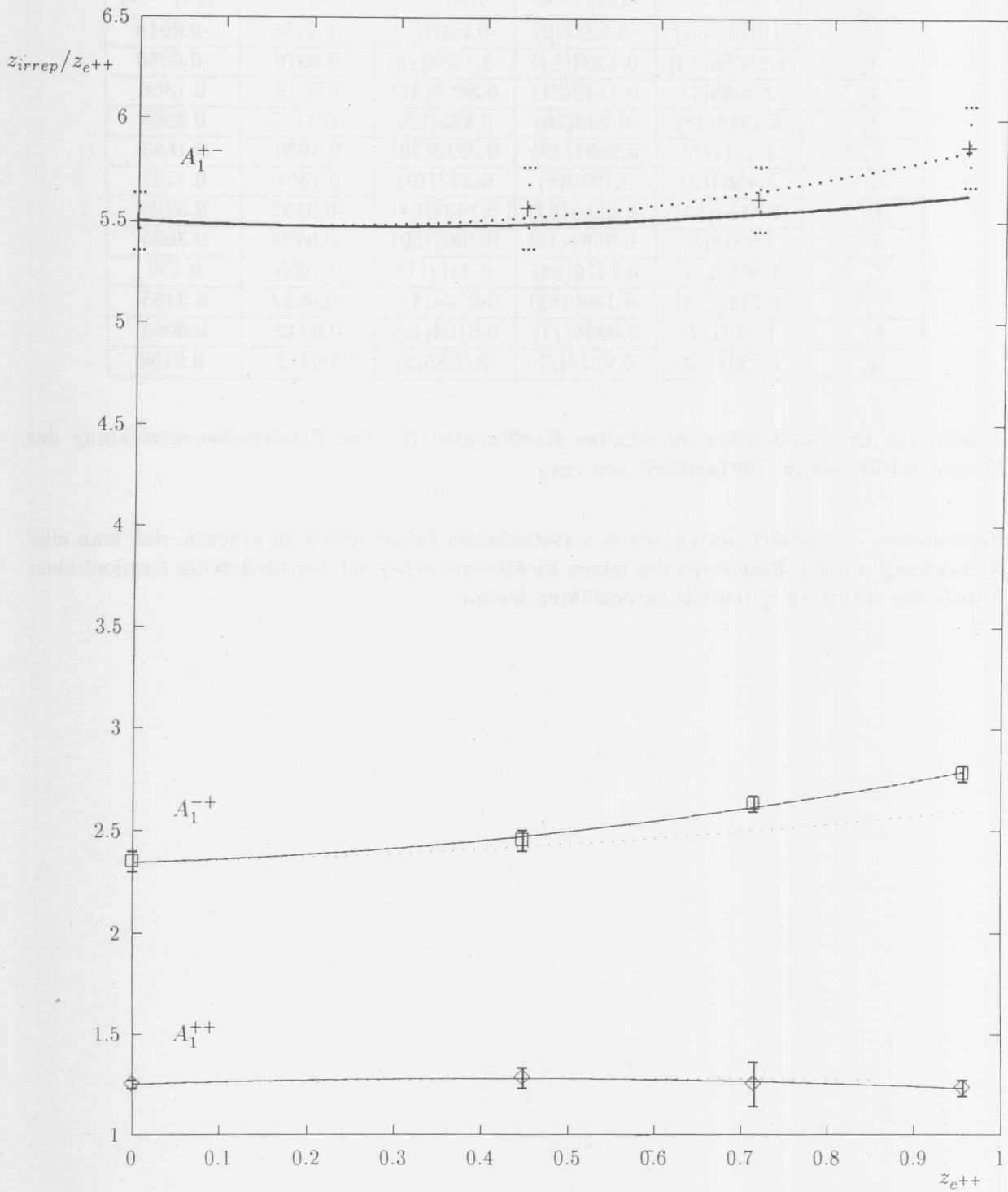


Abbildung 4.3: Massenverhältnisse in Abhängigkeit von der Skalenvariable $z_{E^{++}}$ für die Zustände, die gemäß der irreduziblen Darstellung A_1^{++} , A_1^{+-} und A_1^{-+} transformieren.

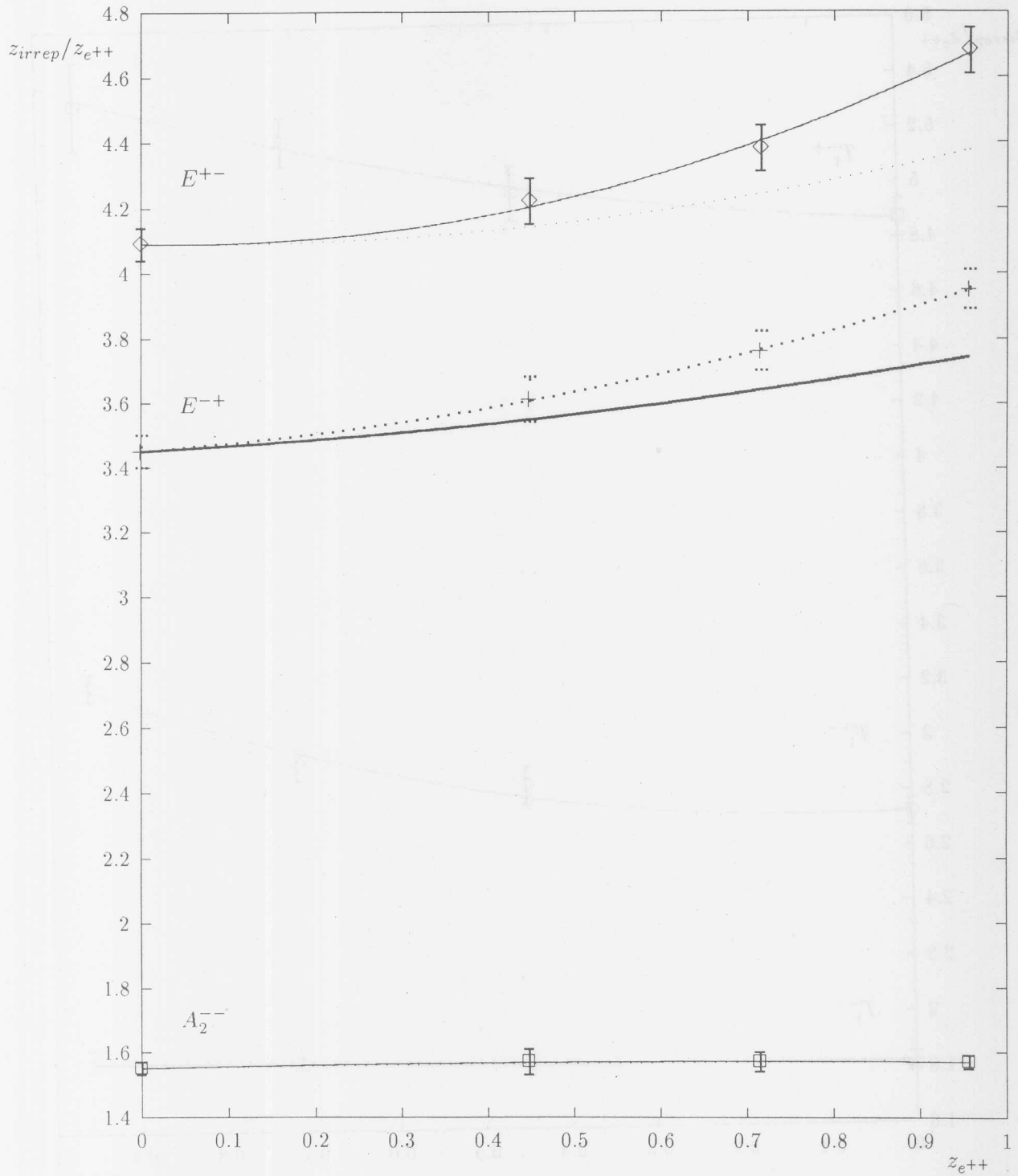


Abbildung 4.4: Massenverhältnisse in Abhängigkeit von der Skalenvariable $z_{E^{++}}$ für die Zustände, die gemäß der irreduziblen Darstellung A_2^{--} , E^{+-} und E^{-+} transformieren.

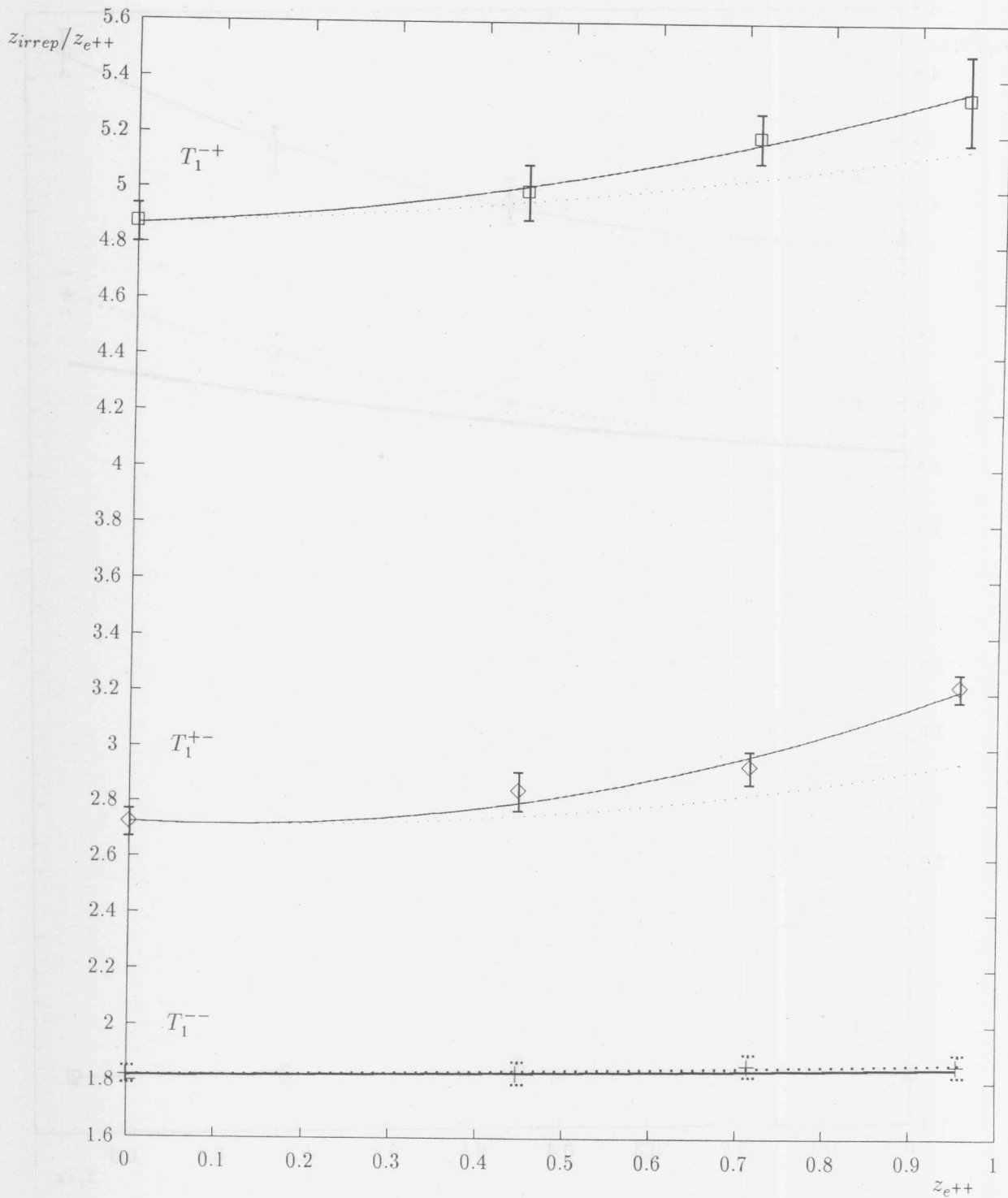


Abbildung 4.5: Massenverhältnisse in Abhängigkeit von der Skalenvariable $z_{E^{++}}$ für die Zustände, die gemäß der irreduziblen Darstellung T_1^{--} , T_1^{+-} und T_1^{-+} transformieren.

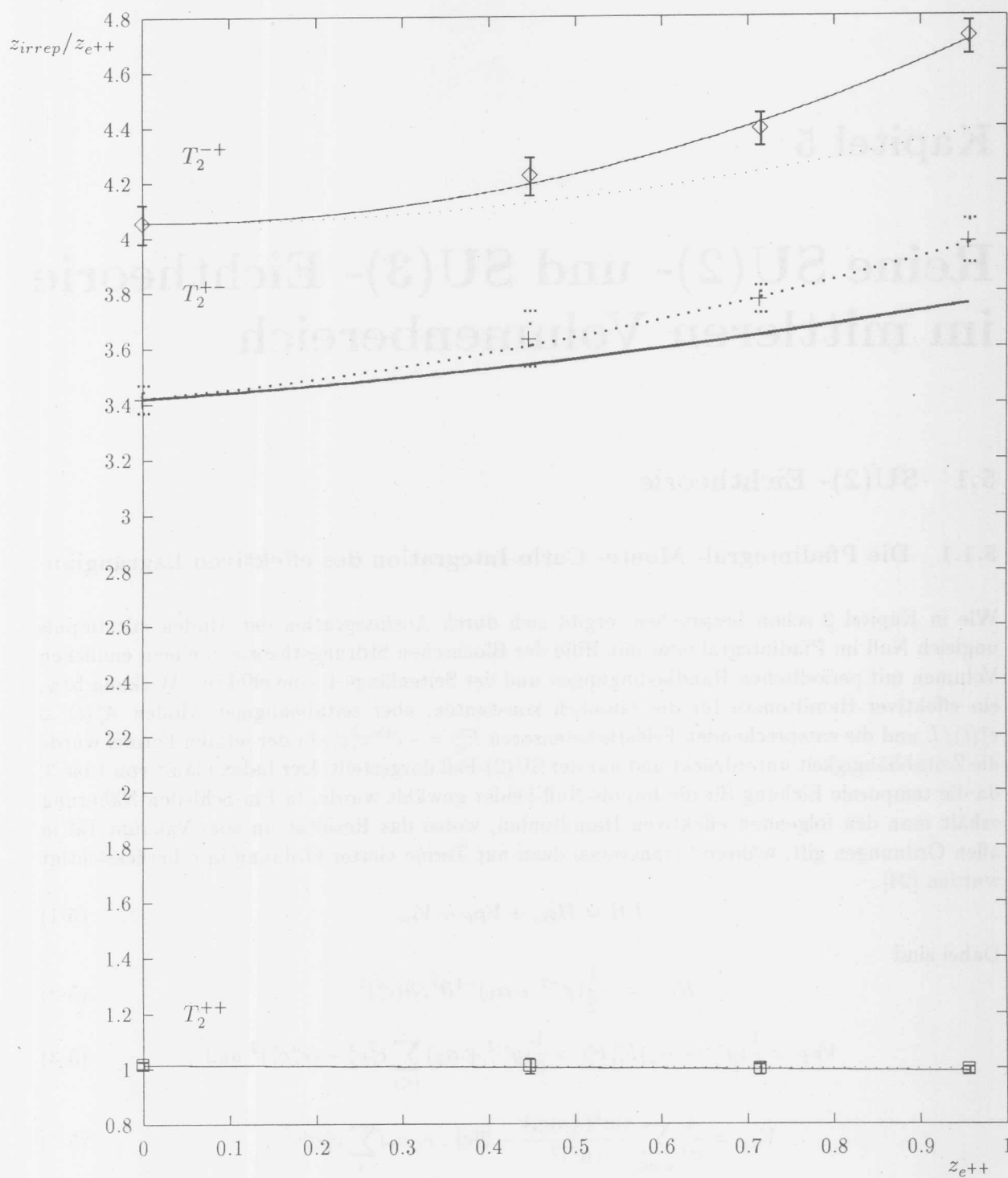


Abbildung 4.6: Massenverhältnisse in Abhängigkeit von der SkalenvARIABLE $z_{E^{++}}$ für die Zustände, die gemäß der irreduziblen Darstellung T_2^{++} , T_2^{+-} und T_2^{-+} transformieren.

Kapitel 5

Reine SU(2)- und SU(3)- Eichtheorie im mittleren Volumenbereich

5.1 SU(2)- Eichtheorie

5.1.1 Die Pfadintegral- Monte- Carlo-Integration des effektiven Lagrangian

Wie in Kapitel 2 schon besprochen, ergibt sich durch Ausintegration der Moden mit Impuls ungleich Null im Pfadintegral oder mit Hilfe der Blochschen Störungstheorie in einem endlichen Volumen mit periodischen Randbedingungen und der Seitenlänge L eine effektive Wirkung bzw. ein effektiver Hamiltonian für die räumlich konstanten, aber zeitabhängigen Moden $A_i^a(t) \equiv c_i^a(t)/L$ und die entsprechenden Feldstärketensoren $F_{ij}^a = -\epsilon^{abc} c_i^b c_j^c$. In der letzten Formel wurde die Zeitabhängigkeit unterdrückt und nur der SU(2)-Fall dargestellt. Der Index i läuft von 1 bis 3, da die temporale Eichung für die Impuls-Null-Felder gewählt wurde. In Ein-Schleifen-Näherung erhält man den folgenden effektiven Hamiltonian, wobei das Resultat im sog. Vakuum-Tal in allen Ordnungen gilt, während transversal dazu nur Terme vierter Ordnung in c berücksichtigt wurden [24].

$$LH = H_{kin} + V_{FF} + V_{tor} \quad (5-1)$$

Dabei sind

$$H_{kin} = -\frac{1}{2}(g^{-2} + \alpha_1)^{-1} \partial^2 / \partial (c_i^a)^2, \quad (5-2)$$

$$V_{FF} = \frac{1}{4}(g^{-2} + \alpha_2) F_{ij}^a F_{ij}^a = \frac{1}{2}(g^{-2} + \alpha_2) \sum_{i < j} c_i^2 c_j^2 - (c_i^a c_j^a)^2 \text{ und} \quad (5-3)$$

$$V_{tor} = \frac{4}{\pi^2} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \frac{\sin^2(\frac{1}{2} \mathbf{n}_i c_i)}{(\mathbf{n}^2)^2} - 2|\mathbf{c}|, \quad c_i = \left(\sum_a c_i^a c_i^a \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5-4)$$

Für die praktischen Berechnungen ist es Computerzeit-ökonomischer, V_{tor} in eine Reihe zu entwickeln. Die Einbeziehung der Terme der Ordnung c^6 dürfte eine ausreichende Näherung für V_{tor} darstellen. Siehe Gl.(5.18) und Tabelle 3 der Ref. [24].

$$V_{tor} \approx \gamma_1 \sum_i c_i^2 + \gamma_2 \sum_i c_i^4 + \gamma_3 \sum_{i > j} c_i^2 c_j^2 + \gamma_4 \sum_i c_i^6 + \gamma_5 \sum_{i \neq j} c_i^4 c_j^2 + \gamma_6 c_1^2 c_2^2 c_3^2, \quad (5-5)$$

wobei

$$c_i = \left(\sum_a c_i^a c_i^a \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5-6)$$

die Länge der c_i^a 's im Farbraum ist. Entsprechend ergibt sich in euklidischer Zeit die effektive Lagrange- Funktion

$$LL = L_{kin} + V_{FF} + V_{tor} \quad (5-7)$$

mit

$$L_{kin} = \frac{1}{2} (g^{-2} + \alpha_1) \frac{dc_i^a}{dt} \frac{dc_i^a}{dt} \quad (5-8)$$

Wie in Kapitel 2 schon erläutert, ergibt sich das Minimum der klassischen Wirkung, wenn alle drei Felder c_i^a im Farbraum parallel sind, d.h. wenn V_{FF} verschwindet. Da die räumlich konstanten Felder $c_i^a(t)$ nur von der Zeit abhängen, trägt in diesem sog. Torontal nur der kinetische Term zur klassischen Wirkung und zur Energie bei, d.h. das Vakuum ist nicht mehr nur der Punkt $c_i^a = 0$, sondern besteht aus allen nicht durch eine Eichtransformation aufeinander abzubildenden Eichfeldkonfigurationen mit der kleinsten Energie. Lüscher führte das Torontal in [20] ursprünglich als die Felder ein, die diagonal im Farbraum sind, d.h. proportional $\frac{\sigma_3}{2}$ im Fall der SU(2). Da auf dem Torus nicht unbedingt die Eichfelder, aber immer die Eichtransformationen periodisch in L sein müssen, lassen sich nicht alle Felder c_i^a durch eine Eichtransformation auf den Ursprung 'zurückeichen'. Felder $c_i^a > 4\pi$ sind allerdings unter den erlaubten Eichtransformationen eichäquivalent zu solchen im Bereich 0 bis 4π , d.h. das Vakuumtal ist periodisch modulo 4π , wenn man eichäquivalente c_i^a zuläßt, oder kompakt, wenn man nur nichteichäquivalente Felder c_i^a zuläßt. (Schon im SU(2)-Fall gibt es die Wahl, ob man das Vakuumtal in σ_3 - Richtung oder $-\sigma_3$ Richtung wählt. Beide Fälle unterscheiden sich nur durch eine konstante Eichtransformation. Im SU(3)-Fall wird das Torontal durch λ_3 und λ_8 parametrisiert. Dadurch ergibt sich eine weitere Mehrdeutigkeit, wie im Unterkapitel zur SU(3) noch gezeigt werden wird.) Da die Lagrangefunktion invariant unter globalen Drehungen im Farbraum ist, kann das Vakuumtal aber in jeder Richtung liegen, solange die drei Felder nur parallel sind. Das Torontal kann dann durch die Längen c_i der drei parallelen Felder parametrisiert werden. Durch Berücksichtigung der Quantenfluktuationen der nichtkonstanten Moden und ihrer Ausintegration in Einschleifennäherung im Pfadintegral erhält man die Terme V_{tor} im effektiven Potential, die die Entartung des Vakuums zu einem Vakuumtal wieder aufheben und dafür sorgen, daß nur die Punkte im Konfigurationsraum mit $c_i = 0$ oder 2π nun quantenäquivalente Vakua bleiben. Die Punkte $c_i = 0$ und 2π sind durch die sog. zentralen Konjugationen verbunden. Dies sind Eichtransformationen, die die beiden Punkte ineinander überführen modulo einer Multiplikation mit einem Element des Zentrums der Gruppe. Beide Felder sind also nicht eichäquivalent zueinander, aber da der Hamiltonian invariant unter dieser Operation ist, sollten beide Felder äquivalente Vakua nach Ausintegration der nichtkonstanten Moden sein. Diese Entartung spielt für kleine Volumina L^3 keine Rolle, da wegen der asymptotischen Freiheit in nichtabelschen Eichtheorien die Kopplungskonstante g in diesem Fall klein ist. Das hat zur Folge, daß der transversale Teil des Potentials groß wird. Dadurch wird das Torontal weit entfernt von den quantenäquivalenten Vakua so eng, daß die Quantenfluktuationen der c_i^a , wenn diese dazu führen, daß die c_i^a nicht mehr parallel sind, einen Beitrag zu einem effektiven Torontenpotential liefern. Dieses effektive Potential stellt für eine Bewegung entlang des Torontals eine so hohe Barriere dar, daß die quantenäquivalenten Vakua praktisch isoliert sind. Mit anderen Worten: Weichen die c_i^a weit entfernt vom Punkt $C_i^a = 0 \forall i \forall a$ durch Quantenfluktuationen von der Parallelität ab, laufen sie sofort in ein hohes transversales Potential. Das Vakuum ist dann so eng, daß ein System mit Quantenfluktuationen es nicht durchqueren kann, ohne einen hohen Energiepreis zu bezahlen, was den Prozeß sehr unwahrscheinlich werden läßt. Man hat bei

diesen kleinen g -Werten dann wieder ein eindeutiges Vakuum. Dieser Fall wurde im Kapitel 4 untersucht.

Wenn g und L größer werden, können auch die c_i größer werden, da die effektive Potentialbarriere kleiner wird. In diesem Fall gewinnt die Möglichkeit des Tunnelns zwischen den 8 quantenäquivalenten Vakua bei $c_i = 0$ oder 2π (für jedes i) an Bedeutung. Man muß den Konfigurationsraum um die 8 Vakua mit 8 Karten parametrisieren. Michael [32, 33] benutzt die Notation, in der neue c_i eingeführt werden, für die immer gilt $c_i < \pi$. Die Karten werden unterschieden durch einen diskreten Index k_i , so daß $r_i = c_i$, wenn $k_i = +1$ und $r_i = 2\pi - c_i$, wenn $k_i = -1$ gesetzt ist, wobei r_i nun die Rolle spielt, die vorher c_i gespielt hatte, d.h. es parametrisiert den gesamten Bereich des Vakuumtals von 0 bis 2π .

Koller und van Baal benutzten den Hamiltonformalismus und umgingen die Berechnung des Spektrums im vollen Konfigurationsraum, indem sie das Tunneln durch Annahme geeigneter Randbedingungen für die Wellenfunktionen an der Stelle $c_i = \pi$ berücksichtigten. (Zur Illustration des Verfahrens stelle man sich den symmetrischen *double well* Oszillator vor: Anstatt das Problem im vollen Konfigurationsraum von $-\infty$ bis ∞ zu lösen, kann man sich zunutze machen, daß alle Eigenfunktionen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bezüglich des Nullpunktes sein müssen. Man kann dann das Problem auf dem eingeschränkten Konfigurationsraum von 0 bis ∞ lösen, indem man für die gesuchten Eigenfunktionen nur Variationsfunktionen zuläßt, die bezüglich des Nullpunktes gerade oder ungerade sind. Dies übersetzt sich in entsprechende Randbedingungen am Ursprung: Die geraden Funktionen müssen aus Symmetriegründen am Ursprung eine verschwindende lokale Steigung haben, während die ungeraden Wellenfunktionen am Ursprung den Funktionswert Null haben müssen.) Man kann die gleiche Vorgehensweise im SU(2)-Fall anwenden, wenn man die Wellenfunktion Ψ als Summe von Produktwellenfunktionen darstellt.

$$\Psi_i(c_1^1, c_1^2, c_1^3, c_2^1, c_2^2, c_2^3, c_3^1, c_3^2, c_3^3) = \sum_{l,m} \psi_i^{l,m}(r_1, r_2, r_3) \Phi^{l,m}(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, \theta_3, \phi_3), \quad (5-9)$$

wobei nun Kugelkoordinaten im Farbraum für die einzelnen c_i^a verwendet wurden. Die von Koller und van Baal verwendete 'adiabatische Näherung' besteht in der Annahme, daß die Fluktuationen um das Vakuumtal von der Art sind, daß für den hier betrachteten Bereich der Kopplung g sich die sogenannte transversale Wellenfunktion Φ immer im Grundzustand $\Phi^{0,0}$ befindet. Unter dieser Annahme kann man die radialen Wellenfunktionen ψ danach klassifizieren, ob sie gerade oder ungerade bezüglich der Operation $r_i \rightarrow 2\pi - r_i$ sind, und entsprechende Randbedingungen am Symmetriepunkt bzw. Symmetrieebene, d.h. hier $r_i = \pi$, fordern, wenn man die Variationswellenfunktion auf den Bereich $r_i < \pi$ einschränkt.

Als Alternative zu dieser Methode, die Wellenfunktion auf einen Koordinatenbereich (eine Karte) einzuschränken, indem man Randbedingungen aufstellt, kann man natürlich versuchen, das Problem auf dem vollen Koordinatenbereich zu studieren. Michael [32, 33] führte hierzu SU(2)-wertige Koordinaten U_i ein, um die 8 Koordinatenbereiche mit nur einer Karte zu parametrisieren und die Topologie des Vakuums dadurch zu berücksichtigen, daß der effektive Hamiltonian bzw. eine effektive Lagrangefunktion als eine Funktion der U_i geschrieben wurde, die gerade in den U_i war und das Potential für kleine C_i reproduzierte, wenn man die U_i um die Einheitsmatrix bzw. die negative Einheitsmatrix in eine Reihe entwickelt:

$$U_j(t) = \cos\left(\frac{1}{2}r_j\right) + i\sigma^a \hat{c}_r^a \sin\left(\frac{1}{2}r_j\right) \quad (5-10)$$

bzw., wenn man die Aufteilung in die 8 Koordinatenbereiche wieder explizit macht, aber dafür die c_i auf den Bereich von 0 bis 2π beschränkt :

$$U_j(t) = k_j \cos\left(\frac{1}{2}c_j\right) + i\sigma^a \hat{c}_j^a \sin\left(\frac{1}{2}c_j\right). \quad (5-11)$$

Wie oben schon erwähnt, nimmt k_j nun die Werte $+1$ oder -1 an, und \hat{c}_j^a ist ein Einheitsvektor in Richtung von c_j^a .

Die Schwierigkeit bei dieser Lagrangian-Methode liegt darin, einen geeigneten Ausdruck für die kinetische Energie derjenigen c_i - Felder zu finden, die für aufeinander folgende Zeitpunkte in verschiedenen Koordinatenbereichen liegen. Michaels erste Wahl für die kinetische Energie war

$$L_{kin} = -2(g^{-2} + \alpha_1)Tr(U_i(t)U_i(t+\epsilon)^\dagger/\epsilon^2, \quad (5-12)$$

wobei ϵ die Zeitdifferenz zwischen benachbarten diskreten Zeitpunkten bezeichnet und der Limes $\epsilon \rightarrow 0$ die Ergebnisse des Hamiltonformalismus von van Baal reproduzieren sollte. Die obige Parametrisierung des Vakuumtals stimmt nur für kleine c_i mit dem effektiven Hamiltonian von van Baal überein. Außerdem wird das Vakuumtal durch die Gruppenmannigfaltigkeit der SU(2) parametrisiert, die topologisch S^3 entspricht, wodurch zwar die Periodizität bzw. Kompaktheit des Vakuumtals und die Rotationsymmetrie unter globalen Eichtransformationen korrekt wiedergegeben wird, aber die flache Metrik der Lie-Algebra durch die gekrümmte von S^3 ersetzt wird. Dies führte dazu, daß das Spektrum nur qualitativ mit dem von Koller und van Baal übereinstimmte.

Van Baal zeigte [25], daß man durch eine stereographische Projektion U-Variablen erzeugen kann, mit denen man wiederum eine U-Variablen Wirkung konstruieren kann, die die c-Variablen-Wirkung in jeder Karte genau reproduziert. Die Verknüpfung zwischen den U- und c-Variablen lautet:

$$U_j(t) = \frac{k_j(\pi^2 - c_j^2) + 2\pi i\sigma^a c_j^a}{\pi^2 + c_j^2}. \quad (5-13)$$

Das Pfadintegral in euklidischer Zeit für die entsprechende effektive Wirkung schreibt sich dann

$$\begin{aligned} Z = & \int \prod_i dU_i \exp\left(\sum_{t,i} -3 \ln(K_i) + 2(g^{-2} + \alpha_1) \frac{Tr(U_i(t)U_i^\dagger(t+\epsilon) - 1)}{\epsilon K_i(t)K_i(t+\epsilon)} \right. \\ & \left. + \epsilon(g^{-2} + \alpha_2) \sum_j \frac{Tr(U_i(t)U_j(t)U_i^\dagger(t)U_j^\dagger(t) - 1)}{(K_i(t)K_j(t))^2} - \epsilon V_{tor}(c(t))\right), \quad (5-14) \end{aligned}$$

wobei

$$K_i = (2 + |Tr(U_i)|)/\pi = 4\pi/(\pi^2 + c_i^2), \quad (5-15)$$

und dU_i das Haarsche Maß für SU(2) ist. Diese effektive Wirkung reproduziert, wie gesagt, in jeder Karte den effektiven Lagrangian, der am Anfang dieses Kapitels angegeben wurde. Der kinetische Term ist proportional

$$(c_i^a(t) - c_i^a(t+\epsilon)) \cdot (c_i^a(t) - c_i^a(t+\epsilon)) \equiv d_i^2, \quad (5-16)$$

wenn sowohl $c_i(t)$ als auch $c_i(t+\epsilon)$ sich in derselben Karte befinden. Dies ist gerade die euklidische Entfernung zwischen zwei Punkten ins Quadrat genommen. In diesem Fall liegen beide Punkte in ein und derselben Karte, die jetzt einer Kugel mit dem Radius π entspricht. Der gesamte Parameterbereich entspricht zwei Kugeln mit dem Radius π , deren Ränder aneinander

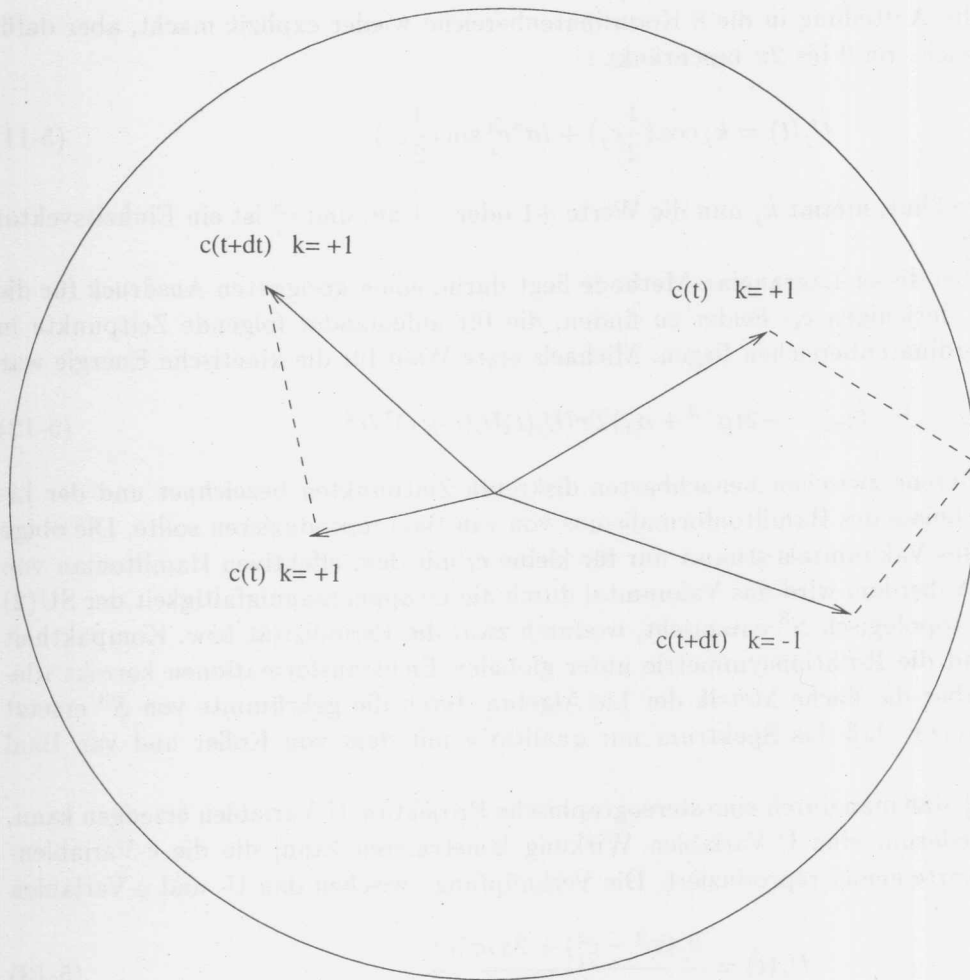


Abbildung 5.1: Bestimmung der geodätischen Entfernung

'geklebt' sind. Diese Topologie spielt dann eine Rolle, wenn das Tunneln zwischen den beiden quantenäquivalenten Vakua wichtig wird, d.h. $r_i(t)$ ist kleiner und $r_i(t + \epsilon)$ größer π . In der Sprache der c_i kann man sich z.B. $c_1(t)$ und $c_1(t + \epsilon)$ als zwei Punkte vorstellen, die jeder in einer Kugel mit dem Radius π liegen. Wird ein c_1 größer als π , gelangt es in die andere Kugel und wird zu einem c_1 mit einem Radius $2\pi - r_i$. Der kinetische Term für den Fall des Tunnelns wird also die Entfernung der beiden Punkte sein, wenn man über die Grenze geht. Die einfachste Annahme wird sein, daß der Weg die geodätische Entfernung über die Grenze der beiden Kugeln sein wird, da die Metrik innerhalb der beiden Kugeln flach ist. Die geodätische Entfernung entspricht einem Weg, der eine Reflektion an der Grenze erleidet, wenn man beide Wege in die gleiche Kugel projiziert. Siehe die nachfolgende Zeichnung: Dabei ist auf der linken Seite die Entfernung zwischen $c_i^a(t)$ und $c_i^a(t + \epsilon)$ als unterbrochene Linie dargestellt für den Fall, daß beide in derselben Kugel liegen, d. h. das gleiche k_i haben, während auf der rechten Seite die geodätische Entfernung über den Rand gezeigt wird, wenn sich $c(t)$ und $c(t + dt)$ (Indizes unterdrückt) in ihren k -Werten unterscheiden.

Allerdings ergibt der kinetische Term, den man mittels der von Baalschen stereographischen Projektion erhält,

$$d_i^2 = (c_i^a(t) - c_i^a(t + \epsilon)) \cdot (c_i^a(t) - c_i^a(t + \epsilon)) + (\pi^2 - c_i^2(t))(\pi^2 - c_i^2(t + \epsilon))/\pi^2 \quad (5-17)$$

ein etwas anderes Ergebnis. Wenn man den Spezialfall $c_i^a(t) = c_i^a(t + \epsilon)$ und $c_i = \pi - \delta$ wählt, erhält man $(2\delta)^2(1 - \delta/(2\pi))$. Man hätte aber erwartet, daß man die minimale Entfernung über die Grenze erhält, nämlich $(2\delta)^2$. Man kann zwar argumentieren, daß für $\epsilon \rightarrow 0$ das erwartete Resultat erreicht wird, da für kleine ϵ auch die akzeptierten δ Werte immer kleiner werden, aber es ist fraglich, wie schnell die Konvergenz erfolgt.

Deshalb wählte Michael den 'natürlichen' kinetischen Term für das Tunneln zwischen den beiden Koordinatenbereichen, indem er die geodätische Distanz für jedes Tunnelereignis berechnete.

Mit den Abkürzungen $p = c_i(t)$ und $q = c_i(t + \epsilon)$ und nach Definition des Winkels ϑ durch $c_i^a(t)c_i^a(t + \epsilon) = pq \cos \vartheta$ ergibt sich mittels des Kosinussatzes ein Ausdruck für den Weg über den Rand

$$d_i^2 = ((p^2 + \pi^2 - 2p\pi \cos \eta\vartheta)^{\frac{1}{2}} + (q^2 + \pi^2 - 2q\pi \cos(1 - \eta)\vartheta)^{\frac{1}{2}})^2. \quad (5-18)$$

Dabei wird das Minimum bezüglich η im Bereich von 0 bis 1 gesucht. Dies geschah in einem vektorisierbaren Programm mittels einer iterativen Zweiteilung des Suchbereichs, wobei nach dem Vorzeichenwechsel von $d(d_i^2)/d\eta$ gesucht wurde. Drei Iterationen ergaben eine Präzision von drei Prozent, was sich als ausreichend herausstellte.

Die eigentliche Monte Carlo Berechnung wurde auf zwei verschiedene Weisen implementiert: Einmal wurden SU(2) Variablen gewählt und Zufallsschritte in S^3 gemacht, indem die SU(2) Matrix mit einer geeignet gewählten Zufallsverteilung multipliziert wurde. Dies entsprach dem Haar Maß für SU(2). Das flache Maß erhielt Michael durch Multiplikation mit dem Korrekturfaktor $\ln K_i$ in der Wirkung. Eine andere Möglichkeit ist, die neuen c_i -Variablen zufällig mit konstanter Dichte in einer Kugel mit Radius π zu wählen und sie zufällig auf die beiden Koordinatenbereiche zu verteilen, d.h. k_i zufällig +1 oder -1. Diese Prozedur wird natürlich für jedes i durchgeführt. Die Akzeptanz ist allerdings auch für den größten gewählten g-Wert nur circa 25%.

Die Zustandssumme für die c-Variablen Formulierung lautet nun:

$$Z = \int \prod_{i,t} \sum_{k_i} d^3 c_i \exp(-\epsilon \sum_t (L_{kin} + V_{FF} + V_{tor})) \quad (5-19)$$

mit

$$L_{kin} = (g^{-2} + \alpha_1) \frac{1}{2} \sum_i d_i^2 / \epsilon^2. \quad (5-20)$$

Dabei ist d_i die Entfernung zwischen $c_i^a(t)$ und $c_i^a(t + \epsilon)$. Es wird immer der kürzeste Weg zwischen beiden Punkten im Farbraum gesucht, egal ob sie sich im gleichen oder in verschiedenen Koordinatenbereichen befinden. Wenn sie verschiedene k_i -Werte haben, wird die minimale Entfernung über den Rand mit Hilfe des binären Suchverfahrens ermittelt.

Die Auswertung des Pfadintegrals erfolgt mit Hilfe des Standard- Metropolis-Algorithmus. Die *mass gaps* werden aus dem Abfallverhalten der Korrelationsfunktionen geeignet gewählter Operatoren bestimmt. Die Operatoren werden klassifiziert durch ihr Transformationsverhalten unter den Symmetrien der effektiven Wirkung. Diese sind alle diskret, da die Rotationssymmetrie durch die Torustopologie auf die Symmetrie der Würfelgruppe heruntergebrochen wird. Außerdem gibt es noch drei zusätzliche diskrete Z_2 -Symmetrien, die man am einfachsten in der ursprünglichen U-Variablen Formulierung sieht: $U_i \rightarrow -U_i$ für festes i . Zustände, die gerade sind unter dieser Operation, sind *glue balls*, während Zustände bzw. Operatoren, die ungerade bezüglich einer oder mehrerer dieser Operationen sind, als Zustände mit einer Einheit des sog. elektrischen Flusses in der betreffenden i-Richtung bezeichnet werden. Die Zustände können also

$irrep^P$	in c-Variablen	in U-Variablen
$A_1^+(0, 0, 0)$	$f_x^2 + f_y^2 + f_z^2$	$Tr_A(U_x) + Tr_A(U_y) + Tr_a(U_z)$
$E^+(0, 0, 0)$	$f_x^2 - f_y^2; f_x^2 + f_y^2 - 2f_z^2$	$Tr_A(U_x) - Tr_A(U_y), etc.$
$T_2^+(0, 0, 0)$	$f_x f_y c_x^a c_y^a$ und zykl. permut.	$Tr_A(U_x U_y) - Tr_A(U_x U_y^\dagger), etc.$
$A_1^-(0, 0, 0)$	$f_x f_y f_z \epsilon^{abc} c_x^a c_y^b c_z^c$	$Tr(U_x U_x U_y U_y U_z U_z) - Tr(U_x U_x U_z U_z U_y U_y)$
$A_1^+(1, 1, 1)$	$f_x f_y f_z$	$Tr(U_x) Tr(U_y) Tr(U_z)$
$T_2^+(1, 1, 1)$	$f_z c_x^a c_y^a$; und zykl. permut.	$Tr(U_z)(Tr_A(U_x U_y) - Tr_A(U_x U_y^\dagger)), etc.$
$A_1^-(1, 1, 1)$	$\epsilon^{abc} c_x^a c_y^b c_z^c$	$Tr(U_x U_y U_z) - Tr(U_x U_z U_y)$
$A(1, 0, 0)$	f_x	$Tr(U_x)$
$B(1, 0, 0)$	$f_x f_y f_z c_y^a c_z^a$	$Tr(U_x)(Tr_A(U_y U_z) - Tr_A(U_y U_z^\dagger))$
$A(1, 1, 0)$	$f_x f_y$	$Tr(U_x) Tr(U_y)$
$B(1, 1, 0)$	$c_x^a c_y^a$	$Tr(U_x U_y) - Tr(U_x U_y^\dagger)$

Tabelle 5.1: Messoperatoren in U - und c-Variablen ausgedrückt

durch jeweils einen Dreiervektor mit den Einträgen 0 oder 1 gekennzeichnet werden. Ein Zustand mit dem Vektor (0,0,0) ist hinsichtlich aller Transformationen $U_i \rightarrow -U_i \forall i$ invariant, ist also ein *glue ball*. Dagegen ist der Zustand niedrigster Energie mit dem Transformationsverhalten (1,0,0) ein einfaches Flußquantum in x-Richtung, ein sog. Tolelon. Zustände, die in allen Richtungen entweder gerade oder ungerade sind, d.h. mit (0,0,0) oder (1,1,1) gekennzeichnet werden, können bezüglich der restlichen räumlichen Symmetrie nach der Würfelgruppe O_h klassifiziert werden. Zustände mit ein oder zwei Flußquanten dagegen nur nach der Gruppe D_4 . Deren irreduzible Darstellungen A_1 und B_2 werden in der folgenden Tabelle mit A oder B bezeichnet.

Die Operation $U_i \rightarrow -U_i$ entspricht in c-Variablen $c_i^a \rightarrow -c_i^a, c_i \rightarrow c_i$ und $k_i \rightarrow -k_i$. Die folgende Tabelle zeigt alle gemessenen Operatoren in U- und c-Variablen.

5.1.2 Abänderungen und Korrekturen der obigen Methode

Änderung der *Updating*-Methode : Schrittweise Änderung und Reflektion bei $r_i = \pi$

Um die Rechnungen von Michael zu überprüfen und Erfahrung für den SU(3)-Fall zu gewinnen, wurde im Rahmen dieser Arbeit noch einmal der Monte-Carlo-Algorithmus für SU(2) implementiert. Dabei wurden nur die Lie-Algebra-wertigen c_i Variablen benutzt. Die Unterschiede zur Implementation von Michael beziehen sich auf die Art Vorschläge für den Metropolis-Algorithmus zu machen. Während Michael die neuen c_i zufällig sowohl in den Kugeln als auch zwischen ihnen verteilte, indem die k_i zufällig als + oder - gewählt wurden, was zu einer sehr kleinen Akzeptanzrate führte, wenn g klein war, werden die c_i hier schrittweise variiert mit einer Schrittweite, die so gewählt ist, daß die Akzeptanzrate immer bei 50% liegt. Es ergibt sich natürlich die Frage, was passiert, wenn ein Schritt über den Rand einer der Kugeln hinausführt. Natürlich dreht sich das Vorzeichen des betreffenden k_i um. Dann wird mit Hilfe des *binary search*-Algorithmus der Schnittpunkt des Pfeils vom alten c_i^a zum vorgeschlagenen neuen $c_i^{a'}$ mit der Grenze $r_i = \pi$ festgestellt. Wenn man den Pfeil von c_i^a nach $c_i^{a'}$ als Weg eines Teilchens betrachtet, wird das Teilchen an der Tangentialebene, die auf dem Auftreffpunkt errichtet wird, wie an einem Spiegel reflektiert, d. h. die Komponenten des Pfeils senkrecht zur Normalen (, die in diesem Fall immer

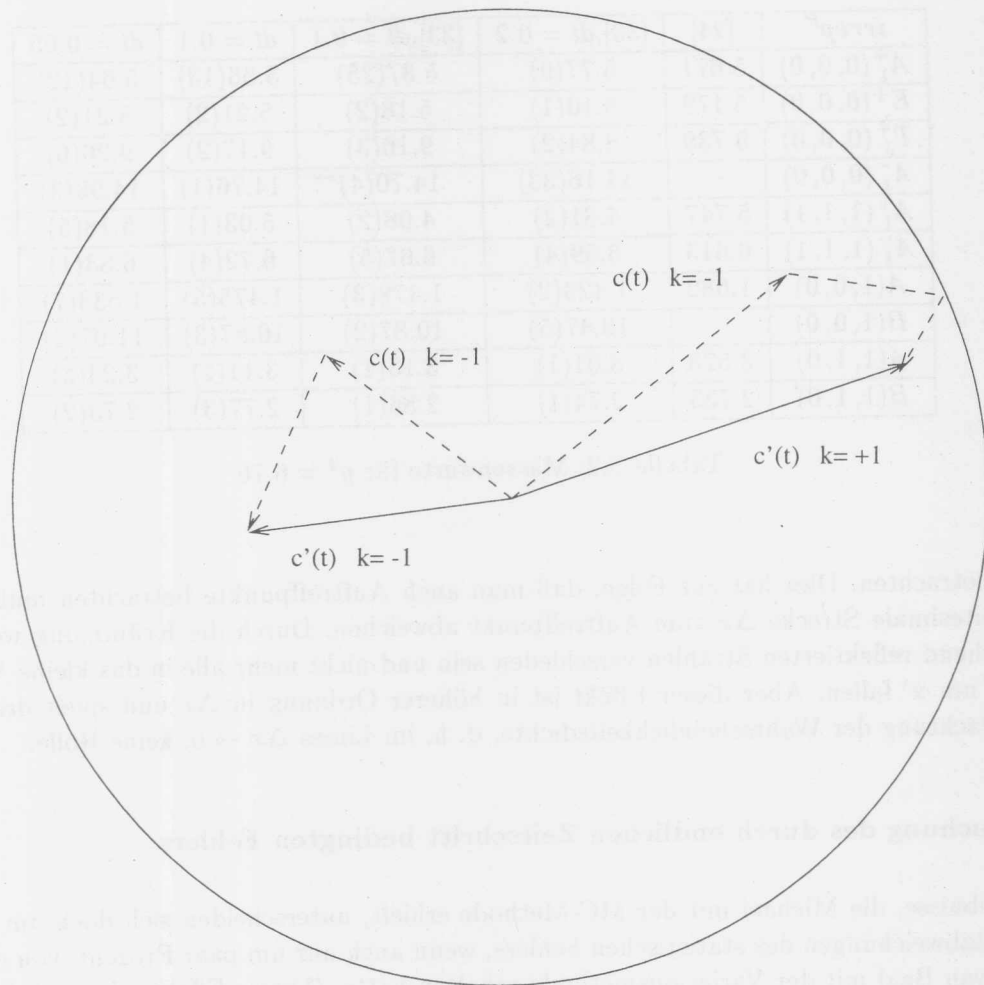


Abbildung 5.2: Vorschlag einer neuen Konfiguration

zum Ursprung zeigt,) bleiben erhalten, während sich die Komponente des noch zu laufenden Weges in Normalenrichtung umkehrt. Dieses Verfahren wird unter Umständen wiederholt, wenn der reflektierte (Rest-)weg wiederum die Kugelgrenze schneidet. In der obigen Abbildung wird auf der linken Seite gezeigt, wie sich durch Addition eines Zufallsvektors (durchgezogene Linie) zum Farbvektor $c(t)$ (durchbrochene Linie, Indizes unterdrückt) der Vorschlag für den neuen Vektor $c'(t)$ ergibt. Auf der rechten Seite ist die gleiche Situation noch einmal für den Fall dargestellt, daß der neue Farbvektor in die andere Kugel wechselt.

Man kann zeigen, daß diese Methode, im Monte-Carlo-Algorithmus neue Konfigurationen vorzuschlagen, das Kriterium

$$T(x', x) = T(x, x') \quad (5-21)$$

erfüllt. (Dies ist wichtig zur Erfüllung der Bedingung des 'detaillierten Gleichgewichts'. Siehe den Abschnitt über *importance sampling* in Unterkapitel 3. 5. 1. . Dies bedeutet, daß, wenn man von x startet, man mit gleicher Wahrscheinlichkeit P nach x' kommt, wie wenn man von x' startend nach x gelangt.

Dies läßt sich auch für gekrümmte Spiegelflächen zeigen, wenn man berücksichtigt, daß P eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist. Man muß also jeweils ein kleines Volumenelement um x und x'

$irrep^P$	[24]	[33], $dt = 0.2$	[33], $dt = 0.1$	$dt = 0.1$	$dt = 0.05$
$A_1^+(0, 0, 0)$	5.671	5.77(9)	5.37(25)	5.56(13)	5.64(12)
$E^+(0, 0, 0)$	5.179	5.10(1)	5.18(2)	5.21(2)	5.21(2)
$T_2^+(0, 0, 0)$	9.739	8.84(2)	9.16(3)	9.17(2)	9.26(6)
$A_1^-(0, 0, 0)$	-	14.16(33)	14.70(4)	14.76(1)	14.98(3)
$A_1^+(1, 1, 1)$	5.747	4.81(2)	4.98(2)	5.03(1)	5.18(5)
$A_1^-(1, 1, 1)$	6.613	6.59(4)	6.67(5)	6.72(4)	6.83(1)
$A(1, 0, 0)$	1.682	1.423(2)	1.478(3)	1.475(5)	1.533(7)
$B(1, 0, 0)$	-	10.47(5)	10.87(2)	10.87(3)	11.07(2)
$A(1, 1, 0)$	3.573	3.01(1)	3.13(1)	3.11(2)	3.23(3)
$B(1, 1, 0)$	2.733	2.74(1)	2.86(1)	2.77(3)	2.73(2)

Tabelle 5.2: Massenwerte für $g^2 = 6.76$

herum betrachten. Dies hat zur Folge, daß man auch Auftreffpunkte betrachten muß, die um die infinitesimale Strecke Δx vom Auftreffpunkt abweichen. Durch die Krümmung werden die entsprechend reflektierten Strahlen verschieden sein und nicht mehr alle in das kleine Volumenelement um x' fallen. Aber dieser Effekt ist in höherer Ordnung in Δx und spielt deshalb bei der Betrachtung der Wahrscheinlichkeitsdichte, d. h. im Limes $\Delta x \rightarrow 0$, keine Rolle.

Untersuchung des durch endlichen Zeitschritt bedingten Fehlers

Die Ergebnisse, die Michael mit der MC-Methode erhielt, unterscheiden sich doch um mehrere Standardabweichungen des statistischen Fehlers, wenn auch nur um paar Prozent, von den Werten, die van Baal mit der Variationsmethode erhalten hatte. (Dieser Effekt zeigt sich besonders bei dem mL-Wert des elektrischen Flusses $A(100)$, der mit einer Genauigkeit gemessen werden konnte, die erst die dritte Stelle nach dem Komma durch den statistischen Fehler unsicher werden läßt.) Diese Differenzen ließen sich auch nicht bei einer Verringerung des Zeitschritts von 0.2 auf 0.1 verringern - eher im Gegenteil -, wobei man im letzten Fall argumentieren könnte, daß sich bei einem Zeitschritt von 0.1 das sog. *critical slowing-down* bemerkbar machte und zu einer längeren Autokorrelationszeit führte, was zu einer Unterschätzung des statistischen Fehlers führte. Um zu überprüfen, ob die Diskrepanz durch die adiabatischen Randbedingungen der van Baalschen Methode oder durch den endlichen Zeitschritt der MC-Methode hervorgerufen wurde, wurden die MC-Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit mit der oben besprochenen abgeänderten Methode noch einmal mit progressiv immer kleinerem Zeitschritt bis zu einer Schrittweite von 0.05 wiederholt. Dabei wurde die Zahl der Zeitscheiben so erhöht, daß die nominale Ausdehnung des Zeitgitters konstant blieb, um Fehler durch 'eine endliche Temperatur' - in der Sprache der Zustandssumme - möglichst auszuschließen. Das führt zur der Notwendigkeit, beim kleinsten Zeitschritt $dt = 0.05$ 960 Zeitscheiben zu verwenden. Insbesondere der $A(1,0,0)$ -Zustand, d. h. ein Zustand mit einer Einheit elektrischen Flusses, und in noch stärkerem Maße der $T_2^+(0,0,0)$ -Zustand, zeigen an, daß der Kontinuumsliches (wenn man einmal van Baals Resultate als Kontinuumsliches annimmt,) noch weit entfernt ist. Eine weitere Verkleinerung des Zeitschritts würde nur in das sog. *critical slowing down* führen. *Multigrid*-Verfahren müßten zur Anwendung gebracht werden, um das zu verhindern.

$irrep^P$	[24], 'dt = 0'	[33], dt = 0.2	dt = 0.2	dt = 0.2 mit dt ² -Korrektur
$A_1^+(0, 0, 0)$	5.671	5.77(9)	5.65(7)	5.55(15)
$E^+(0, 0, 0)$	5.179	5.10(1)	5.07(3)	5.09(1)
$T_2^+(0, 0, 0)$	9.739	8.84(2)	8.82(3)	8.77(3)
$A_1^-(0, 0, 0)$	-	14.16(33)	14.27(3)	14.24(3)
$A1^+(1, 1, 1)$	5.747	4.81(2)	4.85(1)	4.74(3)
$A_1^-(1, 1, 1)$	6.613	6.59(4)	6.55(8)	6.63(2)
$A(1, 0, 0)$	1.682	1.423(2)	1.426(4)	1.404(4)
$B(1, 0, 0)$	-	10.47(5)	10.46(7)	10.43(1)
$A(1, 1, 0)$	3.573	3.01(1)	3.02(1)	2.95(2)
$B(1, 1, 0)$	2.733	2.74(1)	2.73(1)	2.74(1)

Tabelle 5.3: Massenwerte für $g^2 = 6.76$

Als zweite Möglichkeit, den Fehler durch einen endlichen Zeitschritt zu minimieren, ohne dabei in das *critical slowing-down* zu geraten, wurde die Methode verwendet, in der Pfadintegralableitung den Kommutatorterm zwischen kinetischer und potentieller Energie, der zweiter Ordnung im Zeitschritt ist, mitzunehmen. Dies führt wie erwähnt zu einem Korrekturterm zum Potential in der euklidischen Wirkung. (Siehe Unterkapitel 3. 5. 2. .)

$V(x_i^a)$ wird durch

$$V(x_i^a) + \frac{1}{24} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\epsilon}{\hbar}\right)^2 (\nabla V(x_i^a))^2 \quad (5-22)$$

ersetzt. Dabei ist $\nabla = \frac{\partial}{\partial x_i^a}$ der Gradient bezüglich aller x_i^a , wobei sowohl a als auch i von 1 bis 3 laufen. Das Potential ist hier $V_{tor} + V_{FF}$. Wie die folgende Tabelle zeigt, führt auch diese Korrektur des endlichen Zeitschrittfehlers nicht näher an die Variationsergebnisse - eher im Gegenteil. (Die statistischen Fehler sind für die z-Werte, die noch einmal zur Kontrolle beim Zeitschritt $dt = 0.2$ ohne Korrekturterm in der Wirkung berechnet wurden, etwas größer als die von Michael berechneten, da nur 176 Blöcke zu je 250 Messungen berechnet wurden, im Gegensatz zu den 256 Blöcken, die bei Michael die Grundlage für die Fehlerechnung bilden.) Es zeigt sich also, daß der endliche Zeitschritt der MC-Methode wahrscheinlich nicht die Quelle der Differenzen zwischen beiden Methoden ist.

Der Kinetische Term und die Randbedingungen bei $r_i = \pi$

Eine Bestätigung der durch die im letzten Unterkapitel vorgestellten numerischen Ergebnisse gewonnenen Vermutung, daß die Differenzen in der Energie der elektrischen Flüsse und der *mass gaps* zwischen der Monte-Carlo-Methode und der Variationsmethode nicht nur eine Folge des endlichen Zeitschritts waren, brachten Vohwinkels analytische und numerische Untersuchungen der Problematik in einem radikal vereinfachten Spielzeugmodell für den SU(2)-Fall [34]: Da die Diskrepanz zwischen den Ergebnissen der beiden Methoden auch fortbesteht, wenn man das Potential abschaltet [34], kann man auch den Fall eines freien Teilchens betrachten, das sich in zwei Kugeln vom Radius π bewegt, denn das ursprüngliche Problem mit den drei Farbvektoren c_1^a, c_2^a und c_3^a entkoppelt ja in drei unabhängige Teilchen, d. h. die Wellenfunktion des Problems faktorisiert in drei Wellenfunktionen für jeden Farbvektor \vec{c}_i . Aufgrund der Kugelsymmetrie des

vereinfachten Problems bieten sich Kugelkoordinaten zusammen mit einem diskreten Index k_i an, der anzeigt in welcher der beiden am Rand identifizierten Kugeln sich das Teilchen befinden.

$$\tilde{\Psi} = \tilde{\Psi}(r, \theta, \phi, k) \quad (5-23)$$

Aufgrund der Symmetrie des Problems können die Eigenfunktionen danach klassifiziert werden, ob sie symmetrisch oder antisymmetrisch bei Vertauschung der Kugeln sind. Man kann daher die Wellenfunktion durch die auf *eine* Kugel beschränkte Wellenfunktion Ψ und deren Symmetrietyp beschreiben.

Die Randbedingung bei $r = \pi$ ist eindeutig für die antisymmetrischen Wellenfunktionen:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = 0. \quad (5-24)$$

Hingegen kann man für die symmetrischen Wellenfunktionen verallgemeinerte Randbedingungen betrachten [34]:

$$\frac{\partial}{\partial r} \log(r\Psi(r, \theta, \phi))|_{r=\pi} = b. \quad (5-25)$$

Bislang war nur $b = 0$ betrachtet worden. Für jedes b ergibt sich eine bestimmte Basis von Eigenfunktionen. Aufgrund der Kugelsymmetrie des Problems faktorisieren die Funktionen:

$$\Psi_{ilm}(r, \theta, \phi) = j_l(a_i r) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (5-26)$$

Da die von Michael gewählte Definition der kinetischen Energie

$$T_{kin} = d_{geo}/2\epsilon^2 \quad (5-27)$$

die geodätische Entfernung über den Rand der Kugel beinhaltet und diese geodätische Entfernung analytisch die Lösung einer quartischen Gleichung erfordert, berechnet Vohwinkel den Effekt des endlichen Zeitschritts durch eine Berechnung der Transfermatrix mit Hilfe der Van Baalschen Wahl der kinetischen Energie (5-17). Die Transfermatrix zwischen zwei Wellenfunktionen $\tilde{\Psi}$ und $\tilde{\Phi}$ ist dann gegeben durch:

$$T_{\tilde{\Psi}, \tilde{\Phi}} = \sum_{k_1, k_2=0}^1 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, k_1) \tilde{\Phi}^*(\mathbf{r}_2, k_2) K(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, |k_1 - k_2|) \quad (5-28)$$

mit

$$K(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \Delta k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp[-\epsilon T_{Kin}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \Delta k)]. \quad (5-29)$$

Als Ergebnis einer Entwicklung der Transfermatrix für $l = 0$ und einer Raleigh-Ritz-Berechnung mit einem Basissatz von maximal 800 Basiszuständen erhielt er sehr genaue Werte für den Grundzustand, den ersten antisymmetrischen Zustand und dem ersten angeregten Zustand mit $l = 1$ für ϵ -Werte bis $2.0 \cdot 10^{-5}$, z. B.

$$E_0(\epsilon) \approx 0.06882408 - 0.0085092\sqrt{\epsilon} + 0.007\epsilon. \quad (5-30)$$

Ein Vergleich mit einer Monte-Carlo-Rechnung mit van Baals kinetischen Term (5-17) ergibt ausgezeichnete Übereinstimmung im Rahmen des statistischen Fehlers. Eine Wiederholung der Monte-Carlo-Rechnung mit dem von Michael gewählten 'geodätischen' kinetischen Term ergibt Abweichungen von den analytischen Resultaten von der gleichen Größe wie schon in den vollen SU(2)-Rechnungen.

Man kann einen kinetischen Term 'konstruieren', der die mit einem Hamiltonoperator gewonnen

Resultate für das 'Spielzeugmodell' exakt reproduziert. Man erhält aus der Spektraldarstellung des Kurzzeitpropagators [105]

$$e^{-\epsilon L_{Kin}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \Delta k)} = \sqrt{2\pi\epsilon}^3 \sum_{s=0}^1 \sum_{j,l=0}^{\infty} (-1)^{s\Delta k} j_l(\alpha_{slj} r_1) j_l(\alpha_{slj} r_2) P_l(c) e^{-(1/2)\alpha_{s,j}^2 \epsilon}. \quad (5-31)$$

Dabei ist c der Kosinus des Winkels zwischen \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 und α_{0lj} und α_{1lj} sind entsprechend (5-24) und (5-25) gewählt. Man kann die Summen für endlich große ϵ nach l_{max} und j_{max} abbrechen, ohne einen in der Monte-Carlo-Simulation bemerkbaren Fehler einzuführen – für $\epsilon = 0.15$ reichen $l_{max} = 100$ und $j_{max} = 40$. Klarerweise kann man nicht bei jedem Monte-Carlo-Schritt die Summe neu berechnen. Deshalb wurde L_{Kin} , das nur von r_1, r_2 und c abhängt in einer Tabelle mit 50^3 Einträgen tabelliert und alle nicht in der Tabelle erfaßten Werte per Spline-Interpolation gewonnen, wenn sie in der Monte-Carlo-Rechnung benötigt wurden. Mit dieser Methode gelang es Vohwinkel nicht nur in dem Spielzeugmodell die 'Kontinuumswerte' mit der Monte-Carlo-Methode zu reproduzieren, sondern auch im vollen SU(2)-Modell die Resultate von van Baal im Rahmen des statistischen Fehlers zu reproduzieren. Da durch den Potentialterm Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ möglich werden, muß man nun die *mass gaps* für mehrere verschiedenen Zeitschritte berechnen und die Ergebnisse nach $\epsilon = 0$ extrapolieren.

Durch Vohwinkels Arbeit [34] dürfte klar sein, daß die Unterschiede zwischen der Raleigh-Ritz-Methode zur Bestimmung des Spektrums des effektiven Hamilton-Operators und der Monte-Carlo-Methode auf dem Zeitgitter hauptsächlich in der Behandlung des kinetischen Terms begründet sind.

5.2 SU(3)- Eichtheorie

5.2.1 Das Vakuumtal

Im Falle von SU(3) sind die räumlich konstanten Eichfeldkonfigurationen, die den magnetischen Teil der Wirkung minimieren, gegeben durch:

$$A_i(x) = \text{diag}(a_i^1, a_i^2, a_i^3). \quad (5-32)$$

Durch die geforderte Periodizität der Eichtransformationen auf dem Torus lassen sich nicht alle diese 'reinen Eichungen'

$$A_i(x) = g(x) \partial_i g(x)^{-1} \quad (5-33)$$

wieder auf das klassische Vakuum $A = 0$ zurückeichen. Vielmehr sind zwei Felder A_i und \tilde{A}_i eichäquivalent, wenn gilt

$$\tilde{a}_i^b = a_i^{\sigma(b)} \text{ mod } \left(\frac{2\pi}{L}\right), \quad (5-34)$$

wobei σ eine beliebige Permutation der Farbindices b ist, und für alle A gilt

$$\sum_{b=1}^3 a_i^b = 0 \quad (5-35)$$

aufgrund der Tatsache, daß die A -Felder Lie-algebra-wertig und daher spurlos sind. Wieder ist der Hamiltonoperator für eine reine Eichtheorie invariant gegenüber zentralen Konjugationen, die zur Transformation der Eichfelder mit Elementen des Zentrums von SU(3), d. h. Z_3 , führen.

Man wird also entlang des Vakuumtals 3 quantenäquivalente Vakua erwarten. Wenn man ein Element W der $SU(N)$ -Algebra definiert

$$W = \frac{1}{N} \text{diag}(1, \dots, 1, (1 - N)) , \quad (5-36)$$

schreiben sich die quasi-periodischen Eichtransformationen

$$h_{\vec{k}}(x) = \exp\left(\sum_i \frac{2\pi}{L} i k_i x_i W\right), \quad k_i = 0, \dots, (N - 1) . \quad (5-37)$$

Die Eichtransformation $h_{\vec{k}}$ ist quasiperiodisch mit

$$h_{\vec{k}}(x + L\hat{e}_i) = e^{(i\frac{2\pi}{N}k_i)} h_{\vec{k}}(x) . \quad (5-38)$$

Da $SU(3)$ zwei Generatoren hat, die diagonal sind, d. h. miteinander vertauschen, ist das Vakuumtal, in dem das klassische Potential $\propto [A_i, A_j]^2$ gleich Null ist, zwei- bzw. sechsdimensional. Die Gruppe $SU(3)$ hat dem Rang zwei, d. h. es gibt zwei Casimir-operatoren, also auch zwei eichinvariante Polynome. Das erste ist analog $SU(2)$ das Quadrat des 'Radius' im Farbraum.

$$r_i^2 = \sum_{a=1}^8 c_i^a c_i^a = 2\text{Tr}(c_i^2) \quad (5-39)$$

Dabei bezeichnet i den Raumindex. Die Invariante vom Grad 3 ist gegeben durch:

$$s_i = \sum_{a,b,e=1}^8 c_i^a c_i^b c_i^e d_{abe} = 4\text{Tr}(c_i^3) \quad (5-40)$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{3}(-c_8^3 - \frac{3}{2}c_7^2 c_8 - \frac{3}{2}c_5^2 c_8 - \frac{3}{2}c_4^2 c_8 + 3c_3^2 c_8 + 3c_2^2 c_8 + 3c_1^2 c_8) \\ &\quad - \frac{3}{2}\sqrt{3}c_3 c_7^2 - \frac{3}{2}\sqrt{3}c_3 c_6^2 + \frac{3}{2}\sqrt{3}c_3 c_5^2 + \frac{3}{2}\sqrt{3}c_3 c_4^2 \\ &\quad + 3\sqrt{3}c_1 c_5 c_7 - 3\sqrt{3}c_2 c_4 c_7 + 3\sqrt{3}c_2 c_5 c_6 - 3\sqrt{3}c_1 c_4 c_6) \end{aligned} \quad (5-41)$$

Dabei wurde in der letzten Formel auf der rechten Seite der Raumindex i unterdrückt und die Farbindices nach unten gezogen. Man kann zwar die Ränder eines Teilvakuums durch die Invarianten r und s beschreiben, aber diese Wahl wäre unbequem, da die Grenzen komplizierte Funktionen von r und s wären. Stattdessen ist es einfacher, eichinvariante 'x' und 'y' einzuführen. Man definiert :

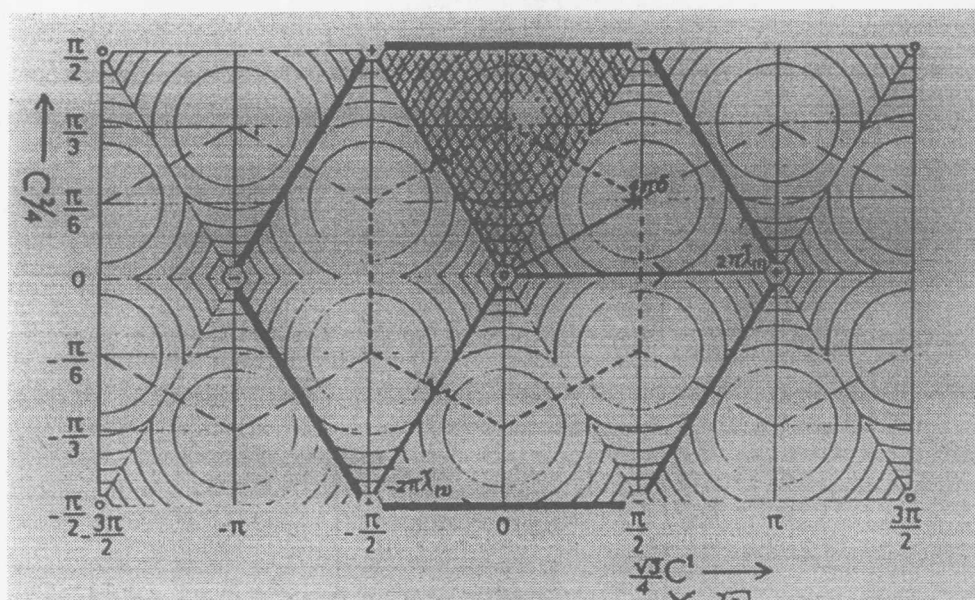
$$\phi_i = \frac{1}{3} \arcsin \sqrt{3} \frac{s_i}{r_i^3} \quad (5-42)$$

$$x_i = r_i \sin \phi_i \quad (5-43)$$

$$y_i = r_i \cos \phi_i$$

Wie im Folgenden gezeigt wird, besteht im Vakuumtal – genauer gesagt in dem in Abbildung 5.3 schraffierten Dreieck – zwischen diesen 'x' und 'y'-Koordinaten und den 3- und 8-Koordinaten eine einfache Beziehung. Man kann eine Feldkonfiguration, die im Vakuumtal liegt, d. h. bei der der Eichfeldkommutator verschwindet, immer in die 3- und 8-Koordinatenebene drehen. Auch wenn die c_i nicht alle miteinander kommutieren, d. h. eine Vakuumkonfiguration vorliegt, kann man zumindestens ein c_i immer in die Diagonalform

$$c_i^a \lambda^a / 2 = \text{diag}(a^1, a^2, a^3), \quad \sum_{b=1}^3 a^b = 0 \quad (5-44)$$



Abbildungung 5.3: Das SU(3)-Vakuumtal.

In der obigen Abbildung steht C^1 für $c_8 \equiv c_i^8$ und C^2 für $c_3 \equiv c_i^3$.

bringen, da die c_i^a ja hermitesche Matrizen sind. Allerdings sind diese 3- und 8-Koordinaten bzw. 'x' und 'y' nicht eindeutig bestimmt, da eine gleichzeitige Permutation der entsprechenden a 's, eichäquivalent zur Ausgangskonfiguration ist. [20] (Im SU(2)-Fall war dies die Wahl von $\sigma_3/2$ oder $-\sigma_3/2$ als Richtung des Vakuums. Eine globale Farbrotaion bildet beide Vakuumkonfigurationen aufeinander ab.)

Entsprechend gibt es auch drei Möglichkeiten zentrale Konjugationen zu bilden, die periodisch sind bis auf ein Element von Z_3 . Zeichnet man das Vakuum und seine durch zentrale Konjugationen erzeugten Bilder in ein 3-8 - Koordinatensystem und errichtet auf halber Strecke zwischen den 'Vakua' senkrechte Trennungslinien auf den Verbindungslinien der Vakua, so wird die 3-8-Ebene in ein hexagonales Gitter von Einzugsbereichen der einzelnen Quantenvakua eingeteilt. In der obigen Abbildung, entnommen aus [19], ist das effektive Potential im Vakuumtal als Höhenlinien eingezeichnet. In dem schraffierten Gebiet liegen die aus (2.30) und (2.31) aus den farbinvarianten r und s errechneten 'x' und 'y'-Koordinaten. In diesem schraffierten Gebiet fallen sie mit den entsprechenden 3- und 8-Koordinaten zusammen. Andere, außerhalb dieses Gebiets, aber ebenfalls nur in der 3-8-Ebene liegende Punkte, erhalten die gleichen r und s -Werte und damit auch 'x' und 'y'-Koordinaten. Man betrachte den Einzugsbereich um den Ursprung. Durch konstante Farbrotaionen wird im gesamten Farbraum ein Gebiet abgegrenzt, wenn die farbrotierten Grenzen im 3-8-Raum auch die Grenzen im gesamten Farbraum bilden. Wie im SU(2)-Fall betrachtet man nur das Einzugsgebiet um das Vakuum um $c_i^a = 0$. Punkte in diesem Gebiet erhalten den diskreten Index $k_i = 0$, Punkte deren r - und/oder s -Werte bzw. x, y -Werte in dem schraffierten Bereich der obigen Abbildung in die Einzugsgebiete der mit '+' oder '-' gekennzeichneten Bereiche fallen, erhalten entsprechend $k_i = +1$ oder $k_i = -1$.

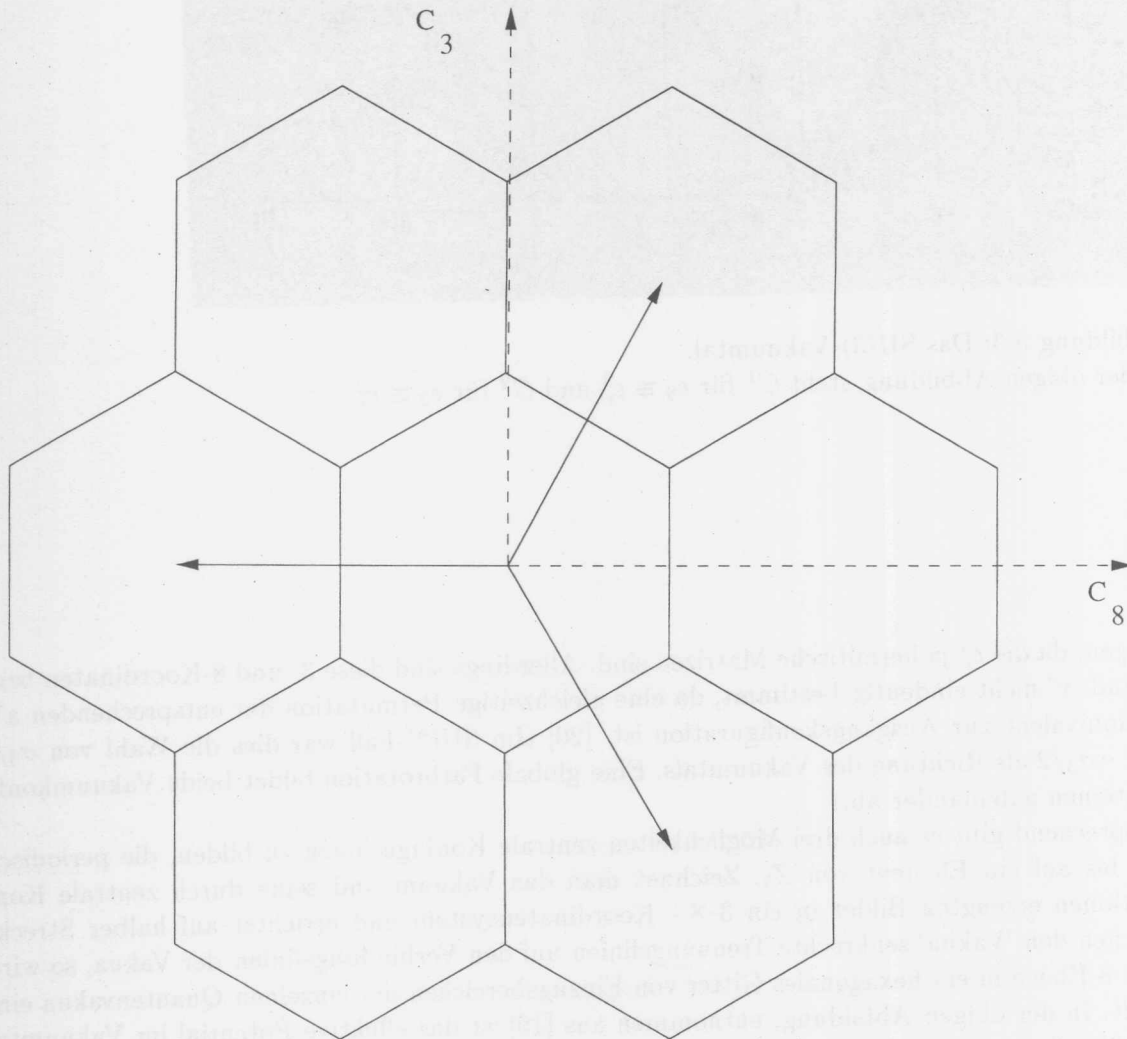


Abbildung 5.4: Der gesamte Bereich des Vakuumtals mit den Einflußbereichen der zentral konjugierten Vakua und deren Weyl-rotierte Kopien. Die drei Pfeile bezeichnen äquivalente zentrale Konjugationen des Vakuums $c = 0$.

5.2.2 Vorschlag einer neuen Konfiguration

Wie im SU(2)-Fall werden neue $c_i^a(t)'$ aus den alten c_i^a durch Addition eines Zufallsvektors mit maximaler Schrittweite S gebildet:

$$c_i^{a'} = c_i^a + f_i^a S, \forall a, \forall i. \quad (5-45)$$

dabei sind die f_i^a gleichverteilte Zufallszahlen im Bereich $[-1, 1]$. Um zu sehen, ob der Vorschlag außerhalb des Kartenbereichs geführt hat, berechnet man aus $c_i^{a'}$ die entsprechenden r' und s' bzw. x' und y' . Wenn man diese hat, läßt sich leicht feststellen, ob die Grenzen überschritten wurden. (Außerdem ergibt sich sofort das neue k_i .) Ist dies der Fall, wird die Strecke $\|c_i^{a'} - c_i^a\|$ und ein Einheitsvektor in Richtung $c_i^{a'} - c_i^a$ bestimmt. Dieser Pfeil von c_i^a nach $c_i^{a'}$ soll wie im SU(2)-Fall an der Tangentialebene des Auftreffpunktes auf die Grenze reflektiert werden. Dazu wird der Schnittpunkt mit der Grenze durch binäre Unterteilung gesucht. Dann wird der Schnittpunkt in die 3-8-Ebene gedreht (wobei die U-Matrizen numerisch bestimmt werden [136])

$$c_s^{diag} = U c_s U^\dagger, \quad (5-46)$$

wobei $c_s = c_s^a t^a / 2$ die Schnittpunktkoordinaten darstellt, und der Raumindex i unterdrückt wurde. Mit derselben Transformationsmatrix U wird der Einheitsvektor in Pfeilrichtung transformiert. Der Pfeil wird dann analog dem SU(2)-Fall in Komponenten in der 3-8-Ebene und die anderen zerlegt. Die Komponenten in der 3-8-Ebene werden an der Grenze reflektiert, die anderen Komponenten bleiben unverändert. Danach wird das Ergebnis mit der inversen Matrix U^{-1} zurücktransformiert und der Weg entlang des neuen Einheitsvektors fortgesetzt.

Diese Prozedur wird unter Umständen wiederholt, falls im weiteren Verlauf des Pfeils erneut eine Grenze getroffen wird.

5.2.3 Berechnung der kinetischen Energie und der Wirkung

Die Berechnung des kinetischen Teils der Wirkung ist einfach, wenn $k_i(t) = k_i(t+\epsilon)$ ist, nämlich $\Delta S_{kin} = \{(c_i^a(t) - c_i^a(t+\epsilon))^2\} / \{2\epsilon\}$. Für den Fall, daß $c_i^a(t)$ nicht im gleichen Bereich wie $c_i^a(t+\epsilon)$ liegt, d. h. sich die entsprechenden k_i 's unterscheiden, wird wieder $\Delta S_{kin} = \{(d_{geo})^2\} / \{2\epsilon\}$ gewählt, wobei d_{geo} die geodätische Distanz zwischen den beiden c_i^a -Vektoren sein soll. Obwohl der einem k_i zugeordnete Bereich nicht mehr die Gestalt einer (Hyper-)Kugel hat, wird das Minimum der Entfernung über den Rand zuerst in der von $c_i^a(t)$ und $c_i^a(t+\epsilon)$ aufgespannten Ebene durch binäre Unterteilung gesucht. Erst danach wird um das Minimum dieser eingeschränkten Suche eine *random-walk*-Suche in allen Dimensionen vorgenommen. Es stellt sich heraus, daß in den meisten aller Fälle das dann erhaltene Minimum nur um einige Prozent von dem der eingeschränkten Suche abweicht.

Bei der Suche der minimalen Entfernung über den Rand werden keine minimalen Wege berücksichtigt, die über zwei Grenzen hinweg führen würden, da eine Minimierung mit Variation von zwei Punkten auf den Grenzflächen zu rechenintensiv wäre. Glücklicherweise sind solche minimalen Wege nur für wenige Konfigurationen möglich, bei denen die Endpunkte der c_i^a -Vektoren nahe den Ecken der Einzugsbereiche der Quantenvakua liegen. Das effektive Potential im Vakuumtal, das durch die transversalen Fluktuationen der c_i^a induziert wird, ist in diesem Bereich am größten, so daß diese Konfigurationen bei den Werten der Kopplung, für die das Tunneln zwischen den Quantenvakua selten ist und in den Minima des effektiven Potentials erfolgt, keine große Rolle spielen werden.

Das effektive Potential, in dem sich die c_i^a bewegen, wird induziert von den Nullpunktsfluktuationen aller räumlich nicht-konstanten Moden und wird hier in der Wirkung bis zur vierten Ordnung transversal zum Vakuumtal und bis zur sechsten Ordnung im Vakuumtal verwendet.

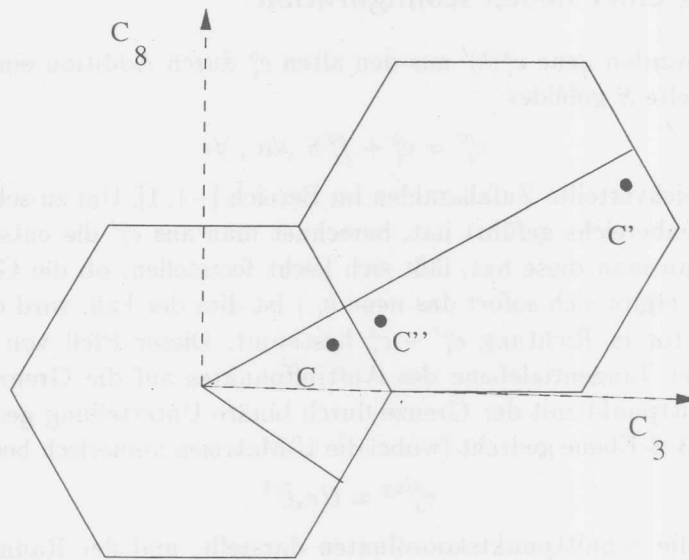


Abbildung 5.5: Beziehung zwischen den zentral konjugierten Eichfeldern c und c' , sowie den auf verschiedenen Seiten einer Grenze liegenden Eichfeldern c und c'' .

5.2.4 Randbedingungen für die angeregten Zustände und Operatoren

[8] Um die Randbedingungen an den Grenzen der Einzugsbereiche der Quantenvakua zu finden, beschränkt man sich wieder darauf, das Transformationsverhalten der Wellenfunktionen im Vakuumtal zu finden, und verallgemeinert die Randbedingungen dann, indem man die Transformationsgesetze eichinvariant formuliert. Wie im Fall von SU(2) kann man wieder den elektrischen Fluß für jede Raumrichtung i unabhängig von den anderen definieren. Die folgende Abbildung zeigt, wie sich eine zentrale Konjugation auf eine Konfiguration nahe der Grenze des Einzugsgebiets auswirkt. Um die Randbedingungen an der Grenze der Einzugsbereiche festlegen zu können, muß man eine zusätzliche Reflektion ausführen und das Verhalten der einzelnen Zustände unter diesen 'Einteilchen'-Reflektionen untersuchen. In der Abbildung wird die auf das Vakuumtal beschränkte Konfiguration $c = (c_3, c_8)$ durch eine zentrale Konjugation auf c' abgebildet. Die Wellenfunktion mit elektrischen Fluß e transformiert sich wie

$$\Psi(c') = e^{i2\pi e/3} \Psi(c) . \quad (5-47)$$

Um die Randbedingungen festzulegen, muß man eine Beziehung zwischen den Konfigurationen c' und c'' herstellen. Man findet[8], daß positive Parität der Wellenfunktion $\Psi(c_3, c_8)$ in i -Richtung die Randbedingung $\Psi(c_3, -c_8) = \Psi(c_3, c_8)$ impliziert und negative Parität $\Psi(c_3, -c_8) = -\Psi(c_3, c_8)$ ergibt. Diese Randbedingungen übertragen sich auch auf die Weyl-rotierten Grenzen zwischen den Quantenvakua. Man findet also für Zustände, die invariant unter Reflektionen sind, einfach Periodizität unter zentralen Konjugationen, während antisymmetrische Zustände an der Grenze zwischen den Einzugsbereichen verschwindende Wellenfunktionen haben müssen. Zur Bestimmung der *mass gaps* der Zustände, die symmetrisch bezüglich der Grenzen sind, wurden wieder die Operatoren aus Tabelle 1 verwendet. (Siehe vorheriges Kapitel.) Analog dem SU(2)-Fall, wo Michael Z_2 -Faktoren für jede 'Einteilchen'-Symmetrie einführte (siehe Tabelle 2 und die Diskussion davor), wurden hier nun ein oder mehrere komplexe Z_3 -Faktoren eingeführt.

$g^2 = 2.56$	[8]	$dt = 0.15$
$z_{E^{++}}$	1.847	1.9(5)
$z_{E^{+-}}$	12.86 (T_2^{+-})	12.7(5)
$z_{A_1^{++}}$	2.919	3.7(8)
$z_{A_1^{+-}}$	13.93	13.4 +/- 1.8

Tabelle 5.4: mL-Werte für $g = 1.6$

$g^2 = 2.56$	[8]	$dt = 0.15$
$z_{T_1^{+-}}$	9.937	9.2(2)
$z_{T_2^{-+}}$	10.28	12.4(1)
$z_{A_2^{--}}$	5.77	4.4(3)
$z_{T_1^{--}}$	4.70	6.0(2)
$z_{A_1^{-+}}$	9.20	8.1(7)
$z_{T_2^{++}}$	3.78	2.8(1)

Tabelle 5.5: mL-Werte für $g = 1.6$

5.2.5 Resultate und offene Probleme

Aufgrund der ungenügenden Statistik, d. h. der rechenzeitintensiven da nicht optimierten Implementierung des Monte-Carlo-Algorithmus', läßt sich bei den E^{++} - und A_1^{++} -Zuständen noch kein Plateau der effektiven Massenwerte erkennen, da das statistische Rauschen mit zunehmenden Zeitabstand in der Korrelationsfunktion anwächst und die obengenannten Zustände mit den verwendeten Operatoren erfahrungsgemäß erst bei größerem Zeitabstand ihr Plateau erreichen. Die angegebenen Werte können deshalb nur obere Grenzen sein.

Die entsprechenden Zustände mit negativer C-Parität zeigen ein etwas besseres Verhalten der Korrelationsfunktionen bzw. der effektiven Massen. Da in [8] keine mL-Werte für die E^{+-} -Zustände angegeben sind, wurde stattdessen der $g = 1.6$ -Wert für den T_2^{+-} -Zustand zum Vergleich herangezogen unter der Annahme, daß beide in mittlerem Volumen zur Spin-2-Darstellung gehören und nicht so stark von der Aufspaltung betroffen sind wie T_2^{++} und E^{++} . Wie im vorherigen Unterkapitel erläutert, haben die T_2^{PC} , A_2^{PC} und T_1^{PC} Randbedingungen zwischen den zentral konjugierten Quantenvakua, die einen Nulldurchgang der entsprechenden Wellenfunktionen an den Grenzen fordern. Um die Energien der Zustände zu 'messen', muß man Operatoren konstruieren, die nur auf diese Zustände projizieren und nicht auf solche mit symmetrischen Randbedingungen. Der Versuch, dies mit komplexen Z_3 -Faktoren zu erreichen, ist fehlgeschlagen, nur die Zustände mit den 'falschen', d. h. symmetrischen Randbedingungen konnten gemessen werden.

Diese zeigen ein wesentlich besseres Verhalten des zeitlichen Abfalls der Korrelationsfunktionen bzw. der effektiven Massen. Man sieht aber insbesondere beim ' T_2^{++} '-Zustand den gleichen Effekt, der schon bei den SU(2)-Rechnungen auftrat: Der Zustand mit falschen Randbedingungen liegt unter dem 'richtigen' T_2^{++} -Zustand, d. h. Zustände, die elektrischen Fluß tragen,

können trotzdem mit ihren Massenwerten unter denen ohne elektrischen Fluß liegen. Man erwartet, daß dieser Effekt ein Artefakt des endlichen Volumens ist und bei Vergrößerung des Torus verschwindet.

μ	1.00	1.00
ν	1.00	1.00
ρ	1.00	1.00
σ	1.00	1.00

Tab. 5.1 mit Werten für $\epsilon = 1$

μ	1.00	1.00
ν	1.00	1.00
ρ	1.00	1.00
σ	1.00	1.00

Tab. 5.2 mit Werten für $\epsilon = 1$

5.2.2. Hohlraum und offene L-cylinder

Die in den vorherigen Kapiteln mit negativer Ω -Funktion gezeigten zwei positiven Werten μ und ν sind die einzigen Lösungen der Gleichung $\mu^2 + \nu^2 = 1$. In [2] kann man die E^{++} - und E^{--} -Zustände nach dem Vorzeichen des elektrischen Flusses unterscheiden, da die elektrische Ladung mit dem Vorzeichen der E^{++} - und E^{--} -Zustände übereinstimmt. Die E^{++} -Zustände sind die E^{--} -Zustände mit dem Vorzeichen umgekehrt. Die E^{++} -Zustände sind die E^{--} -Zustände mit dem Vorzeichen umgekehrt.

Die in den vorherigen Kapiteln mit negativer Ω -Funktion gezeigten zwei positiven Werten μ und ν sind die einzigen Lösungen der Gleichung $\mu^2 + \nu^2 = 1$. In [2] kann man die E^{++} - und E^{--} -Zustände nach dem Vorzeichen des elektrischen Flusses unterscheiden, da die elektrische Ladung mit dem Vorzeichen der E^{++} - und E^{--} -Zustände übereinstimmt. Die E^{++} -Zustände sind die E^{--} -Zustände mit dem Vorzeichen umgekehrt. Die E^{++} -Zustände sind die E^{--} -Zustände mit dem Vorzeichen umgekehrt.

Die in den vorherigen Kapiteln mit negativer Ω -Funktion gezeigten zwei positiven Werten μ und ν sind die einzigen Lösungen der Gleichung $\mu^2 + \nu^2 = 1$. In [2] kann man die E^{++} - und E^{--} -Zustände nach dem Vorzeichen des elektrischen Flusses unterscheiden, da die elektrische Ladung mit dem Vorzeichen der E^{++} - und E^{--} -Zustände übereinstimmt. Die E^{++} -Zustände sind die E^{--} -Zustände mit dem Vorzeichen umgekehrt. Die E^{++} -Zustände sind die E^{--} -Zustände mit dem Vorzeichen umgekehrt.

Schlußbemerkungen

Im Rahmen dieser Arbeit wurde gezeigt, daß die Monte-Carlo-Methode auch bei Problemen, die von der Zahl der Freiheitsgrade eher dem Bereich der Quantenmechanik als dem der Quantenfeldtheorie zuzurechnen sind, mit den traditionellen Methoden der Quantenmechanik wie z.B. der Variationsmethode konkurrieren kann. Dabei lassen sich die gleichen Techniken verwenden, die auch bei der Berechnung von sog. Gittereichtheorien zur Anwendung kommen, — nur das das Raum-Zeit-Gitter der Gittereichtheorie auf ein Zeitgitter reduziert wird. Außerdem sind die behandelten Probleme gekennzeichnet durch das Vorhandensein mehrerer entarteter Potentialminima ('Vakua'), zwischen denen Tunnelübergänge stattfinden können. Diese Entartung ist eine Folge einer Z_N -Symmetrie der Hamiltonfunktion der reinen Eichtheorie $SU(N)$. Die in der Hamiltonfunktion des Systems auftretende Kopplungskonstante hängt als sog. 'laufende Kopplungskonstante' von der linearen Ausdehnung des räumlichen Volumens des Systems ab, dessen toroidale Topologie die ebenfalls toroidale Topologie des Konfigurationsraumes der Systemfreiheitsgrade bestimmt. Wenn diese Kopplungskonstante nun sukzessive vergrößert wird, gelangt man ab einem gewissen Wert der Kopplung von einem Bereich, in dem die Tunnelrate exponentiell unterdrückt und die Aufspaltung der Spektren durch das Tunneln unmeßbar klein ist — dem sog. Bereich kleinen Volumens —, zu einem qualitativ anderen Bereich, in dem die Tunnelrate groß ist und starke Auswirkungen auf die Energie der verschiedenen Zustände haben kann. So wird z. B. die Entartung der sich nach der irreduziblen Darstellung der Würfelgruppe transformierenden Zustände E und T_2 , die im Limes unendlich grossen Volumens einen Spin-2-Zustand bilden würden, in diesem sog. Bereich mittelgroßen Volumens aufgehoben. Weiterhin ist das hier vorliegende Potentialproblem insofern unkonventionell, als das Potential es den 'Teilchen' erlauben würde, im sog. Vakuumtal aus dem Einflußbereich je eines der entarteten sog. Quantenvakua zu entkommen, wenn nicht ihre Quantenfluktationsbewegung transversal zum Vakuumtal einen effektiven Potentialberg induzieren würde, der sie für kleine Werte der Kopplung auf den Bereich um je ein Quantenvakuum beschränkt. Es zeigt sich nun, daß die Monte-Carlo-Methode auch die räumliche Beschränkung durch dieses dynamische, von Quantenfluktationen induzierte Potential genauso effektiv simuliert wie solche, die durch herkömmliche Potentialterme in der Hamiltonfunktion bedingt sind.

Im kleinen Volumenbereich, d. h. wenn Tunneleffekte zu vernachlässigen sind, erhält man folgende Ergebnisse: Die *mass gaps*, d. h. die Differenzen zwischen dem ersten angeregten Zustand und dem Grundzustand, lassen sich mit einer Genauigkeit von wenigen Prozent oder besser bestimmen. Außerdem hat die Diskretisierung der Zeit im Rahmen dieser Genauigkeit keinen Einfluß auf die Ergebnisse. Daß der Einfluß des endlichen Zeitschritts gering (Größenordnung ein Prozent) ist, wurde durch Variation des Zeitschritts von 0.2 auf 0.1 bzw. 0.15 gezeigt. Dementsprechend zeigen die Massenverhältnisse für $SU(2)$ auch nur für größere Werte der Skalenvariablen $z_{E+} = m_{E+}L$, die die lineare Ausdehnung des Torusvolumens, gemessen in Compton-Wellenlängen des niedrigsten *mass gaps* bzw. *glue balls*, angibt, nahe dem Tunnelübergang Abweichungen von den Raleigh-Ritz-Ergebnissen. Da man in diesem Bereich eine abnehmende Genauigkeit der Variationsrechnung erwartet, sprechen diese geringen Abweichungen nicht unbedingt gegen die Monte-Carlo-Methode. Eine Überprüfung der von van Baal gefundenen Umskalierungsformel von Raleigh-Ritz-Ergebnissen der reinen Eichtheorie auf Ergebnisse mit 3 masselosen Fermionen (Quarks) durch direkten Vergleich mit den Monte-Carlo-Ergebnissen zeigt ebenfalls nur Abweichungen im Prozentbereich. Da die Umskalierung Terme vierter Ordnung in der Entwicklung der Energien nach Potenzen von $g^{2/3}$ nicht berücksichtigt, ist eine vollständige Übereinstimmung wohl auch nicht zu erwarten. Die Vorteile der quantenmechani-

schen Monte-Carlo-Methode zeigen sich insbesondere dann, wenn es aufgrund der Problemstellung schwierig ist, eine möglichst vollständige Basis für die Berechnung der Matrixelemente im Raleigh-Ritzschen Variationsverfahren zu finden.

So erwiesen sich die Variationsrechnungen für SU(3) im kleinen Volumen als sehr viel schwieriger als im Fall der SU(2)-Eichgruppe, da Weisz und Ziemann für einige Zustände nur sehr kleine Basissätze finden konnten. (Zwar konnte Vohwinkel die Schwierigkeiten von Weisz und Ziemann, eine Basis für den Fall des effektiven Hamiltonoperators der reinen SU(3)-Eichtheorie auf dem Torus zu finden, überwinden, aber die von ihm verwendete Basis ist auf die Berechnung von Matrixelementen im mittleren Volumen optimiert, so daß die Genauigkeit im kleinen Volumen beeinträchtigt sein könnte [8].)

Für die Monte-Carlo-Methode stellt sich dieses Problem nicht. Eine einzige Basisfunktion kann als Projektor auf den jeweiligen Zustand dienen, wobei sich die Zustände nach den irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe transformieren und durch ihr Verhalten unter Paritäts- und (im Fall der SU(3)) C-Paritätsoperationen klassifiziert werden können. Die einzige Schwierigkeit, die bei der Implementierung der MC-Methode auftritt, ist durch die Tatsache bedingt, daß für einige Zustände auch die einfachsten möglichen Polynome, die sich entsprechend transformieren, schon viele Summationen über verschiedene Farb- und Raumindizes erfordern. Diese lassen sich nicht als simple Verschachtelung von Programmschleifen programmieren, da in diesen dann meistens nur Null aufaddiert würde. Also empfiehlt es sich, einige der Summen von Hand auszuführen und die Teilergebnisse dann geschickt zu verknüpfen. Meistens erhält man mit den in dieser Arbeit verwendeten Projektoren Plateaus in den effektiven-Masse-plots, d. h. die *mass gap*-Bestimmungen sind in einem Bereich von mehreren Zeitschritten unabhängig vom Zeitabstand zwischen den Operatoren, die man benutzt, um den Erwartungswert der entsprechenden Korrelationsfunktionen zu bestimmen. Diese Tatsache und die Stabilität der Ergebnisse gegenüber Variationen des Zeitschritts lassen die Vermutung berechtigt erscheinen, daß die Monte-Carlo-Resultate deshalb deutlich unter den Ergebnissen der Raleigh-Ritz-Rechnungen liegen, weil die Basissatzgröße der Variationsrechnungen nicht ausreichte, so daß die Variationswellenfunktion der wahren Wellenfunktion nicht nahe genug kommen konnte. Man kann nun ein Polynom (zweiter Ordnung) in z_{E++} an die Monte-Carlo-Daten für jeweils einen Zustand anpassen und dieses Ergebnis wieder mit der van Baalschen Methode umskalieren, um die Ergebnisse für SU(3) im kleinen Volumenbereich mit drei masselosen Quarks zu erhalten.

Im sog. mittleren Volumenbereich wurden die Massenverhältnisse für SU(2) sowohl ohne als auch mit (masselosen) Fermionen schon von Michael [33] mit der quantenmechanischen MC-Methode berechnet. Seine Vorgehensweise, im Metropolis-Algorithmus neue Konfigurationen vorzuschlagen, die Tunnelübergängen zwischen zwei Einzugsbereichen von Quantenvakua entsprechen, läßt sich nicht einfach auf den SU(3)-Fall im mittleren Volumen übertragen. Deshalb wurde die Methode der 'Reflektion am Rand' eingeführt und am Fall der reinen SU(2)-Eichtheorie getestet. Im Rahmen der statistischen Fehler ergibt sich eine perfekte Übereinstimmung der Ergebnisse. Der Versuch, mit noch kleineren Zeitschritten dem durch die van Baalschen Ergebnisse vorgegebenen Kontinuumslimit in der Zeit näher zu kommen, war nicht vollständig erfolgreich, da bei immer kleinerem Zeitschritt im Metropolis-Algorithmus das sog. *critical slowing down* die Effizienz der Rechnung immer mehr einschränkt. Ein Versuch mit einer verbesserten Wirkung, die Terme zweiter Ordnung im Zeitschritt berücksichtigt, brachte ebenfalls keine Annäherung an den Kontinuumslimit. Eine an den höherdimensionalen SU(3)-Fall angepasste Variante der Reflektionsmethode wurde dann für den Fall der reinen SU(3)-Eichtheorie in mittlerem Volumen erprobt. Die Ergebnisse zeigen noch größere statistische Fehler als im SU(2)-Fall, da der Algorithmus noch nicht optimiert ist und zu viel Rechenzeit zur Erzeugung einer neuen Konfigu-

ration verbraucht. Der Hauptgrund dafür ist sicher in der Tatsache zu suchen, daß die Reflektion am Rand bei der Berechnung einer neuen Konfiguration für den Metropolis-Algorithmus sich auf numerische Methoden bei der Diagonalisierung der Farbmatrizen stützt, was die Rechnung verlangsamt, wenn zuviele Konfigurationen vorgeschlagen werden, die über den Rand des Einzugsgebiets eines der zentral konjugierten Vakua hinausgehen, d. h. wenn die Tunnelrate nicht mehr klein ist. Eine Methode, die wahllos die Vorschläge plaziert, wäre sicher ebenfalls ineffektiv. Eine Möglichkeit, diese Schwierigkeit zu überwinden, könnte darin bestehen, den Konfigurationsraum in kleinere Bereiche mit Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen diesen aufzuteilen [33]. Die Suche nach einem Minimum des Weges über den Rand ist ebenfalls noch nicht optimiert. Beide Probleme sorgen dafür, daß im Rahmen dieser Arbeit mit der zur Verfügung stehenden Rechenzeit im Fall der reinen SU(3)-Eichtheorie die statistischen Fehler der Resultate noch zu groß sind. Außerdem muß das Problem der Randbedingungen für die Zustände mit negativer 'Einteilchen-Parität' noch gelöst werden. Daher konnten von den eigentlich interessierenden *glueball*-Zuständen nur die *mass gaps* der sich nach den irreduziblen Darstellungen von A_1^{++} , A_1^{+-} , E^{++} und E^{+-} transformierenden Zustände 'gemessen' werden – und davon wiederum nur die Zustände mit negativer C-Parität mit einer Genauigkeit von 5 bis 15 Prozent. Hingegen haben die Zustände, die sog. 'elektrischen Fluß' tragen, nämlich die T_1^{+-} , T_2^{+-} , A_2^{--} , T_1^{--} , A_1^{+-} und T_2^{++} -Zustände mit geraden Randbedingungen, ein besseres Verhalten des zeitlichen Abfalls der Korrelationsfunktionen der zugeordneten Meßoperatoren (in imaginärer Zeit), d. h. die statistischen Fehler sind kleiner und liegen im Prozentbereich. Vergleicht man nun deren effektive *mass gaps* mit den Ergebnissen der Variationsmethode, so sieht man, daß diese, wie schon im SU(2)-Fall festgestellt wurde, meist unter den mL-Werten der Zustände ohne 'elektrischen Fluß' liegen. Da aber in einem Bereich der Kopplungskonstante g gemessen wurde, in dem die Tunnelaufspaltung noch nicht so groß ist, war auch zu erwarten, daß die Zustände mit beigemischtem 'elektrischen Fluß' sich nicht allzusehr von denen ohne 'elektrischen Fluß' unterscheiden. Diese Ergebnisse zeigen also, daß eine Verallgemeinerung der Monte-Carlo-Methode auf einem 'Zeitgitter' auch auf den komplizierteren Fall der effektiven SU(3)-Eichtheorie möglich ist.

Obwohl derzeit der Übergang vom 'mittleren' in den großen Volumenbereich durch Einbeziehung von Instantonkonfigurationen auf S^3 im Mittelpunkt des Interesses steht [67, 68], da es auf dem Torus keine analytischen Ein-Instanton-Lösungen gibt, bleibt die Einbeziehung insbesondere masseloser Fermionen im Fall der SU(3)-Eichtheorie auf dem Torus und der Vergleich mit Gittereichtheoriesimulationen mit dynamischen Fermionen, bei denen eben zwangsläufig immer noch die Torustopologie zugrunde gelegt wird, sicher weiter interessant. Auch erhält man bei der Berechnung effektiver Hamilton-operatoren mit *periodischen* Fermionen oder im Fall der reinen SU(3) Eichtheorie mit C-periodischen Randbedingungen mehrere entartete Vakua. Hier könnte es ebenfalls vorteilhaft sein, das Monte-Carlo-Verfahren anzuwenden. Vorher sollte allerdings das Problem des Kontinuumslimits auf dem Zeitgitter näher untersucht werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden erste Untersuchungen dazu gemacht. Vohwinkel [34] hat dann an einem vereinfachten Model sehr genau gezeigt, daß die Differenzen zwischen dem Monte-Carlo-Verfahren und der Variationsmethode auf die Definition der kinetischen Energie beim Tunnelübergang zurückzuführen sind. Obwohl die Differenzen zwischen beiden Methoden gering sind, sollten sie wegen der angestrebten hohen Genauigkeit im Detail untersucht und, wenn möglich, beseitigt werden.

Appendix: Erzeugung von (Pseudo-)Zufallszahlen

Da die Erzeugung wirklicher Zufallszahlen in einem Computer (einem deterministischen Automat) nicht möglich ist, (außer mit spezieller Hardware), erzeugt man eine Folge von Pseudozufallszahlen mit statistischen Eigenschaften, die denen wahrer Zufallszahlen so nahe wie möglich kommen. Die Technik, die man benutzt, besteht darin, eine Transformation auf eine Basiszahl im Generatorspeicher anzuwenden, um eine neue Zahl aus dem alten Wert zu erhalten. Um die übernächste Zahl zu erhalten wird die Transformation auf die neue Zahl angewandt. Dieser Prozeß wird dann für die neueste Zahl wiederholt usw. usf. Durch geeignete Wahl der Basiszahl und der Transformation ist es möglich, eine Folge von Zahlen mit den gewünschten Eigenschaften – wie z.B. vernachlässigbare Korrelation zwischen aufeinanderfolgenden Zahlen – zu erzeugen. Für Monte-Carlo-Anwendungen benutzt man meist Generatoren, die gleichverteilt Zufallszahlen zwischen 0 und 1 erzeugen.

Alle Pseudozufallszahlengeneratoren haben eine endliche Zykluslänge, bevor die Zahlenfolge sich wiederholt. Für den hier verwendeten Generator der NAG-Unterprogrammbibliothek G05CAF (doppelt genau) ist die Zykluslänge 2^{57} . Als Faustregel sollte man in einer Rechnung nie mehr Zufallszahlen verwenden als die Wurzel aus der Zykluslänge beträgt, da sonst die statistischen Eigenschaften beeinträchtigt sein könnten. Wichtig ist auch, daß die statistischen Eigenschaften der Pseudozufallszahlen nur innerhalb einer Folge garantiert sind und nicht zwischen Folgen mit verschiedenen Anfangswerten. Wiederholte Initialisierung führt daher zu Zahlen, die eine größere statt kleinere Abhängigkeit aufweisen. Deshalb muß man den Zustand des Zufallszahlengenerators retten, wenn man das Programm unterbricht, und vor dem Neustart den alten Zustand wiederherstellen.

Der Generator G05CAF beruht auf einem 'multiplikativ kongruenten' Algorithmus [137].

$$b_{i+1} = 13^{13} b_i \text{ mod } 2^{59} \quad (5-48)$$

b_{i+1} wird durch 2^{59} geteilt, um eine Zahl zwischen 0 und 1 zu erhalten. Der Wert von b_i wird intern im Programm gespeichert. Der erste Wert b_0 wird standardmäßig auf $123456789(2^{32} + 1)$ gesetzt.

In den letzten Jahren wurde die Qualität von Pseudozufallszahlengeneratoren im Hinblick auf die Verwendung in Monte-Carlo-Rechnungen von Ferrenberg u.a. [139] kritisch überprüft, indem das 2-dimensionale Ising-Modell, das analytisch exakt berechnet werden kann, mit dem Wolff'schen *Cluster*-Algorithmus, dem Swendsen-Wang-Algorithmus und dem Standard Metropolis-Algorithmus unter Verwendung verschiedener Typen von Zufallsgeneratoren numerisch berechnet wurde. Dabei zeigte sich, daß gerade ein moderner Zufallszahlengenerator vom *shift register*-Typ zusammen mit dem Wolff-Algorithmus nicht vernachlässigbare systematische Fehler hervorrief, während ein 32-bit kongruenter Generator Ergebnisse produzierte, die korrekt waren innerhalb der Fehlerbalken. Allerdings lassen sich auch für die linear kongruenten Generatoren systematische Fehler nicht ausschließen. Im Licht der obengenannten Ergebnisse hat Lüscher einen sogenannten *subtract-with-borrow*-Algorithmus weiterentwickelt, der dessen chaotischen Eigenschaften verbessert und damit unkorrelierte Zufallszahlen mit einer extrem langen Periode garantiert [138].

Danksagungen

Ich danke Prof. J. Bartels für seine Unterstützung und Geduld.

Hilfreich waren auch Gespräche mit G. Schierholz, P. van Baal, C. Vohwinkel, P. Weisz, H. - G. Evertz, T. Kalkreuter, M. Grabenstein und K. Pinn.

Von Oktober 1990 bis September 1991 wurde diese Arbeit vom BMFT als 'Graduiertenkollegstipendium' finanziert.

Mein besonderer Undank gilt der Firma NAG.

Literaturverzeichnis

- [1] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [2] R. P. Feynman und A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, New York (McGraw-Hill) 1965.
- [3] C. Grosche, *Path integrals, hyperbolic spaces, and Selberg trace formulae*, World Scientific Publishing Co, Singapore 1996.
- [4] K. Symanzik, J. Math. Phys. **7** (1966) 510.
- [5] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller und E. Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.
- [6] J.B. Bronzan, Phys. Rev. **D31** (1985) 2020–2028
- [7] R.P. Feynman,
'Difficulties in Applying the Variational Principle to Quantum Field Theories',
pp. 28–40 in L. Polley and D.E.L. Pottinger (eds.),
Variational Principles in Quantum Field Theory,
(Proceedings Wangerooge 1987), Singapore (World Scientific) 1988.
- [8] C. Vohwinkel, Thesis, Tallahassee 1989.
- [9] C. Vohwinkel, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 2544.
- [10] P. Weisz and V. Ziemann, Nucl. Phys. **B284** (1987) 157.
- [11] P. Becher, M. Böhm, H. Joos., *Eichtheorien der starken und elektroschwachen Wechselwirkung*, Teubner 1981.
- [12] Kerson Huang, *Quarks, Leptons & Gauge Fields*, World Scientific Publishing Co, Singapore 1982.
- [13] V. N. Gribov, 'Possible Solution of the Problem of Quark Confinement', LU-TP-91-7, Vortrag während des 'Perturbative QCD' Workshops in Lund, Schweden, 21. bis 24. Mai 1991.
- [14] M. Creutz, *Quarks, Gluons and Lattices*, Cambridge University Press.
- [15] J. Carpenter, C. Michael und M. Teper Nucl. Phys. **B314** (1989) 347.
- [16] S. Gottlieb, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **53**(1997) 155.
- [17] SESAM collaboration: G. S. Bali, et al. , Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **53**(1997) 239.

- [18] J.D. Bjorken, 'Elements of Quantum Chromodynamics', in Proc. Summer Institute on Particle Physics, ed. A. Mosher, SLAC report no. 244(1980).
- [19] P. van Baal, Talk presented at the Workshop 'Probabilistic Methods in Quantum Field Theory and Quantum Gravity', Cargèse August 21-27 1989, Preprint THU-89/32.
- [20] M. Lüscher, Nucl. Phys. **B219** (1983) 233.
- [21] M. Lüscher und G. Münster, Nucl. Phys. **B232** (1984) 445.
- [22] J. Koller und P. van Baal, Nucl. Phys. **B273** (1986) 387.
- [23] J. Koller und P. van Baal, Ann. of Phys. **174** (1987) 299.
- [24] J. Koller und P. van Baal, Nucl. Phys. **B302** (1988) 1.
- [25] P. van Baal, Phys. Lett. **B224** (1989) 397.
- [26] A. Di Giacomo, hep-th/9603029.
- [27] V. Bornyakov und G. Schierholz, Phys. Lett. **384B** (1996) 190.
- [28] Yu. A. Simonov, hep-ph/9509403.
- [29] L. Del Debbio, A. Di Giacomo, G. Paffuti, P. Pieri, Phys. Lett. **349B** (1995) 513.
- [30] P. van Baal, Nucl. Phys. **B307** (1988) 274, Erratum: Nucl. Phys. **B312** (1989) 752.
- [31] J. Kripfganz and C. Michael, Phys. Lett. **209B** (1988) 77.
- [32] J. Kripfganz and C. Michael, Nucl. Phys. **B314** (1989) 25.
- [33] C. Michael, Nucl. Phys. **B329** (1990) 225.
- [34] C. Vohwinkel, Nucl. Phys. **B443** (1995) 417.
- [35] M.S. Swanson, *Path Integrals and Quantum Processes*, San Diego (Academic) 1992.
- [36] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, New York (Wiley-Interscience) 1981.
- [37] H. Tiedemann, Phys. Rev. **D44** (1991) 1280.
- [38] C. Michael, Liverpool preprint LTH 370, hep-ph/9605243.
- [39] G. 't Hooft, Nucl. Phys. **B153** (1979) 141.
- [40] V. Ziemann, Diploma-Thesis, Hamburg 1986.
- [41] B. Berg and A. Billoire, Phys. Rev. **D40** (1989) 550.
- [42] B. Berg and C. Vohwinkel, Phys. Rev. **D40** (1989) 584.
- [43] A. González-Arroyo und C. P. Korthals Altes, Nucl. Phys. **B311** (1988/89) 433.
- [44] A. S. Kronfeld und U.-J. Wiese, Nucl. Phys. **B357** (1991) 521.
- [45] A. S. Kronfeld und U.-J. Wiese, Nucl. Phys. **B401** (1993) 190.

- [46] D. Daniel, A. Gonzáles-Arroyo und C. P. Korthals Altes, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **20**(1991) 16.
- [47] D. Daniel, A. Gonzáles-Arroyo , C. P. Korthals Altes und B. Söderberg, Phys. Lett. **B221** (1989) 136.
- [48] D. Daniel, A. Gonzáles-Arroyo und C. P. Korthals Altes, Phys. Lett. **B251** (1990) 559.
- [49] P. W. Stephenson, Nucl. Phys. **B356** (1991) 318.
- [50] P. Martínez und P. van Baal, Nucl. Phys. **B429** (1994) 451.
- [51] P. de Forcrand, M. García Pérez und I. -O. Stamatescu, hep-lat/9509064.
- [52] M. García Pérez und A. Gonzáles-Arroyo, J. Phys.A:Math. Gen. **26** (1993) 2667.
- [53] M. García Pérez, A. Gonzáles-Arroyo und B. Söderberg, Phys. Lett. **B235** (1990) 117.
- [54] A. Gonzáles-Arroyo, P. Martínez und A. Montero, Phys. Lett. **B359** (1995) 159.
- [55] A. Gonzáles-Arroyo und P. Martínez, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **42**(1995) 241.
- [56] A. Gonzáles-Arroyo und A. Montero, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **47**(1996) 294.
- [57] A. Gonzáles-Arroyo und A. Montero, Phys. Lett. **B387** (1996) 823.
- [58] A. Gonzáles-Arroyo und P. Martínez, Nucl. Phys. **B459** (1996) 337.
- [59] A. S. Kronfeld, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **20**(1991) 20.
- [60] B. van den Heuvel, Phys. Lett. **B359** (1995) 159.
- [61] B. van den Heuvel, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **53**(1997) 808.
- [62] T. Heinzl, preprint hep-th/9604018.
- [63] P. van Baal und N. D. Hari Dass, Nucl. Phys. **B385** (1992) 185.
- [64] P. van Baal und B. M. van den Heuvel, Nucl. Phys. **B417** (1994) 215.
- [65] P. van Baal und B. M. van den Heuvel, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **42**(1995) 823.
- [66] B. van den Heuvel, Phys. Lett. **B386** (1996) 233.
- [67] P. van Baal, preprint hep-th/9705112.
- [68] P. van Baal, preprint hep-lat/9709066.
- [69] M. S. O'Connor und R. D. Viollier, Ann. of Phys. **248** (1996) 286.
- [70] M. Engelhardt und B. Schreiber, in Proceedings of the Workshop on QUANTUM INFRARED PHYSICS, Paris 1994, H. M. Fried, B. Müller (Eds.), World Scientific 1995.
- [71] F. Lenz, H. W. L. Naus und M. Thies, Ann. of Phys. **233** (1994) 317.
- [72] S. Chapman, Phys. Rev. **C47** (1993) 1763.
- [73] B. Petersson und T. Reisz, Nucl. Phys. **B353** (1991) 757.

- [74] P. Lacock, D. E. Miller und T. Reisz, Nucl. Phys. **B369** (1992) 501.
- [75] L. Kärkkäinen, P. Lacock, B. Peterson und T. Reisz, Nucl. Phys. **B395** (1993) 733.
- [76] L. Kärkkäinen, P. Lacock, D. E. Miller, B. Peterson und T. Reisz, Nucl. Phys. **B418** (1994) 3.
- [77] T. Reisz, Z. Phys. **C53** (1992) 169.
- [78] J. B. Kim und T. Reisz, Phys. Lett. **B308** (1993) 94.
- [79] W. Kutzelnigg: *Einführung in die theoretische Chemie*, Verlag Chemie 1975.
- [80] R.N. Barnett and K.B. Whaley, Z. Phys. D **31** (1994) 75.
- [81] S. Tanaka, J. Chem. Phys. **100** (1994) 7416.
- [82] Zhiwei Sun, M. M. Soto, Robert N. Barnett, und William A. Lester, J. Chem. Phys. **101** (1994) 394.
- [83] V. N. Staverov, P. Langfelder und S. M. Rothstein, J. Chem. Phys. **108** (1998) 2873.
- [84] J. W. Moskowitz, K. E. Schmidt, M. A. Lee und M. H. Kalos, J. Chem. Phys. **77** (1982) 349 .
- [85] P.J. Reynolds, J. Tobochnik und H. Gould, Computers in Phys. (1990) 662–668.
- [86] D.M. Ceperly und B.J. Alder , Science **231** (1986) 555 .
- [87] J.B. Anderson, J. Chem. Phys. **63** (1975) 1499, J. Chem. Phys. **65** (1976) 4121, J. Chem. Phys. **73** (1980) 3897.
- [88] D.M. Ceperly und M.H. Kalos, in *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, edited by K. Binder, (Springer Verlag, 1979).
- [89] M.H. Kalos, D. Levesque und L. Verlet, Phys. Rev. A **9** (1974) 2178.
- [90] P. J. Reynolds, D. M. Ceperly, B.J. Alder , W. A. Lester,Jr. , J. Chem. Phys. **77** (1982) 5593.
- [91] F. Mentch und J. B. Anderson, J. Chem. Phys. **80** (1984) 2675.
- [92] Bin Chen und J.B. Anderson, J. Chem. Phys. **102** (1995) 2802.
- [93] R. N. Barnett, P. J. Reynolds und W. A. Lester,Jr. , J. Chem. Phys. **84** (1986) 4992.
- [94] D. R. Garner und J. B. Anderson, J. Chem. Phys. **86** (1987) 4025,7237 .
- [95] D. M. Ceperly und B. J. Alder , Phys. Rev. Lett. **45** (1980) 566.
- [96] M. Arnow, M. H. Kalos, M. A. Lee und K. E. Schmidt, J. Chem. Phys. **77** (1982) 5562.
- [97] D.M. Ceperly in *Recent Progress in Many-Body Theories*, J. G. Zabolitzky, M. de Llano, M. Forbes und J. W. Clark (Hrsgb.)(Springer Verlag 1981), Konf. Oaxtepec 1981.
- [98] R. N. Barnett und K. B. Whaley, J. Chem. Phys. **99** (1993) 9730.

- [99] M. A. Suhm und R. O. Watts, *Phys. Rep.* **204** (1991) 293.
- [100] Kenneth A. Franken und Clifford E. Dykstra, *J. Chem. Phys.* **100** (1994) 2865.
- [101] Marius Leverenz, *J. Chem. Phys.* **104** (1996) 1028.
- [102] D. M. Ceperly, *Rev. Mod. Phys.* **67** (1995) 279.
- [103] J. K. Gregory, D. J. Wales und D. C. Clary, *J. Chem. Phys.* **102** (1995) 1592.
- [104] C. W. Greef, W. A. Lester, Jr. und B. L. Hammond, *J. Chem. Phys.* **104** (1996) 1973.
- [105] H. Kleinert, *Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik*, BI-Verlag 1993.
- [106] M. H. Kalos und P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods, Volume I: Basics*, Wiley Interscience 1986.
- [107] J. P. Allen und D. J. Tildesly, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press 1990.
- [108] G. Bhanot, *Rep. Progr. Phys.* **51** (1988) 429-456.
- [109] M. Creutz und B. Freedman, *Ann. Phys.* **132** (1981) 427-462 .
- [110] P. A. Fernandes, A. P. Carvalho und J. P. P. Ramalho, *J. Chem. Phys.* **103** (1995) 5720 .
- [111] M. F. Herman, E. J. Bruskin und B. J. Berne, *J. Chem. Phys.* **103** (1995) 5720 .
- [112] J. Barker, *J. Chem. Phys.* **70** (1979) 2914 .
- [113] A. Giasanti, G. Jacucci, *J. Chem. Phys.* **89** (1988) 7454 .
- [114] J. Cao und B. J. Berne, *J. Chem. Phys.* **91** (1989) 6359 .
- [115] M. Lüscher und U. Wolff, *Nucl. Phys.* **B339** (1990) 222.
- [116] G. Ritzenhöfer and K. Schilling, *Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.)* **42** (1995) 929.
- [117] H. Flyberg und H. Peterson, *J. Chem. Phys.* **91** (1989) 461.
- [118] L. Cruzeiro-Hansson, J.O. Baum und J.L. Finney, *Physica Scripta* **T33** (1990) 122.
- [119] L. Cruzeiro-Hansson, J.O. Baum und J.L. Finney, *J. Comp. Phys.* **104** (1993) 110.
- [120] W. Janke und T. Sauer, *Chem. Phys. Lett.* **201** (1993) 499.
- [121] M. Takahashi und M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53** (1984) 963.
- [122] M. Takahashi und M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53** (1984) 3765.
- [123] K. G. Wilson, *Phys. Rev.* **D10** (1974) 2445.
- [124] C. M. Becchi, F. Palumbo, *Nucl. Phys.* **B388** (1992) 595.
- [125] K. Cahill, *Phys. Lett.* **B304** (1993) 307.
- [126] K. Cahill, *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **34**(1994) 231.

- [127] K. Cahill, G. Herling, Phys. Lett. **B365** (1996) 239.
- [128] D. DeVault, *Quantum-mechanical Tunneling in Biological Systems (2nd edn)*, Cambridge University Press 1984.
- [129] A. Kuki und P. G. Wolynes, Science **236**, 1647 (1987).
- [130] Chong Zheng, Chung F. Wong, J. A. McCammon und P. G. Wolynes, Nature **334**, 726 (1988).
- [131] D. Marx und M. Parinello, Nature **375**, 216 (1995).
- [132] D. Marx und M. Parinello, Science **271**, 179 (1996).
- [133] D. Marx und M. Parinello, J. Chem. Phys. **104**, 4077 (1996).
- [134] Programm GNUPLOT, An Interactive Plotting Program, Thomas Williams and Colin Kelley, Version 3. 5.
- [135] Routine g05CAF der Numerical Algorithm Group.
- [136] Routine ZHPEVF der ESSL-Library.
- [137] D. E. Knuth , *The Art of Programming Vol.2*, Addison Wesley (2nd Ed.) 1981.
- [138] M. Lüscher, Computer Physics Communications **79** (1994) 100.
- [139] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau, Y. Joanna Wong , Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 3382.

