FACHBEREICH PHYSIK
BERGISCHE UNIVERSITÄT
GESAMTHOCHSCHULE WUPPERTAL

η'-Masse und String-Breaking-Signale in der vollen QCD

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Bergischen Universität-Gesamthochschule Wuppertal

vorgelegt von

Thorsten Struckmann

aus Baden

WUB-DIS 2000-5

Juni 2000

Abstract

One of the main goals of the SESAM/TχL collaboration is to explore the structure of the full QCD vacuum within the framework of lattice calculations.
In this work we concentrate on two aspects of this question: The contribution of disconnected diagrams to the η' mass and the search for signals of string breaking due the effects of virtual quark anti-quark pairs.
Our analyses were done on the SESAM/TχL QCD configurations with dynamical Wilson fermions at $\beta = 5.6$ which cover a m_π/m_ρ range of 0.57 to 0.83 with an extrapolated inverse lattice spacing of $1/a \approx 2.3$ GeV.

The flavor singlet meson η' should obtain its relatively large mass by large contributions from disconnected diagrams which vanish for octet mesons. The evaluation of these noisy two loop correlators is a numerically demanding task.
We discuss various methods and improvements of quark loop estimation on our configuration sample. We find that the use of $O(400)$ smeared stochastic Z_2 source vectors per configuration makes the η' propagator accessible to standard spectrum methods. We extract η' observables which, after chiral extrapolation, are $15-25$ per cent below the pseudoexperimental $N_f = 2$ values. This could of course be an $O(a)$ effect or due to a nontrivial extrapolation from the $N_f = 2$ world to reality. A quenched reference analysis leads to similar results. We find large contributions to η' observables from topologically nontrivial configurations. This justifies qualitatively the theoretical picture which relates the η' mass with the $U(1)$ anomaly. These dependencies seem to be absent for light spectrum observables.

The observation of string breaking, the energetically favored decay of a static quark anti-quark pair into a static-light meson pair, above a certain separation should be a qualitative feature of full QCD simulations.
In the framework of a two channel mixing anlysis we estimate and improve noise to signal ratios of the static quark pair and the transition amplitudes. We determine the expected string breaking distance from the mass of two static-light mesons and the static quark anti-quark potential. It turns out that string breaking should in principle be observable on our TχL lattices. Again, smeared sources lead to a significant noise reduction at the relevant separations.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **5**

2 Diskretisierte QCD **11**

2.1 Pfadintegralquantisierung 11

2.2 Quantenchromodynamik 12

2.3 QCD auf dem Gitter 13

2.3.1 Grundlagen 13

2.3.2 Die Wilson-Wirkung 14

2.4 Simulation der vollen QCD 16

2.4.1 Monte Carlo Simulationen der QCD 16

2.4.2 Systematische Fehler und Extrapolationen 17

2.4.3 $N_f = 2$-QCD durch SESAM/TχL 19

3 η'-Masse in der $N_f = 2$-QCD **21**

3.1 Einleitung und Theoretische Grundlagen 22

3.1.1 Das $U(1)$-Problem 22

3.1.2 $U(1)_A$-Anomalie und Topologie des Vakuums 23

3.1.3 Der Witten-Veneziano-Ansatz 25

3.2 Observable auf dem Gitter 26

3.2.1 Der η'-Propagator 26

3.2.2 η' in der vollen QCD 27

3.2.3 η' in der quenched Näherung 28

3.3 Berechnung des connected Korrelators 28

3.3.1 Der connected Korrelator 29

3.3.2 Geschmierte Operatoren . . . 29
3.4 Der disconnected Korrelator . . . 30
3.4.1 Die Stochastic-Estimator-Technik (SET) . . . 30
3.4.2 Die Volume-Source-Methode . . . 33
3.4.3 Geschmierte Operatoren . . . 33
3.4.4 Volume-Source und SET auf dynamischen Konfigurationen . . . 34
3.4.5 Volume-Source und SET auf quenched Konfigurationen . . . 41
3.4.6 Rahmendaten der Analysen . . . 41
3.5 Analyse der vollen QCD . . . 44
3.5.1 Experimentelle 'Vergleichsgrößen' . . . 45
3.5.2 Korrelationsfunktionen . . . 45
3.5.3 Massen und Extrapolationen . . . 46
3.6 Ergebnisse der reinen Eichtheorie . . . 54
3.6.1 Korrelationsfunktionen und Massen . . . 54
3.6.2 Chirale Extrapolationen in der quenched Näherung . . . 56
3.7 Quark-Loops und topologische Ladung . . . 59
3.8 Topologische Ladung und Teilchenmassen . . . 61
3.8.1 η'-Observable . . . 62
3.8.2 Das leichte Massenspektrum . . . 62
3.9 Zusammenfassung . . . 63

4 String-Breaking-Signale in der vollen QCD 65
4.1 Einleitung und theoretische Ansätze . . . 65
4.1.1 String-Breaking mit Wilsonloops? . . . 66
4.1.2 String-Breaking als Mischungsphänomen . . . 67
4.1.3 Verallgemeinertes Eigenwertproblem . . . 69
4.1.4 Welche Signalqualitäten sind möglich? . . . 70
4.2 Bestimmung des Brechungsabstandes r_b . . . 71
4.2.1 Static-Light-Mesonmassen . . . 71
4.2.2 Messung des Statischen Potentials . . . 74

4.3 Übergangsmatrixelemente 77
4.3.1 Physikalisches Bild und Dirac-Struktur 77
4.3.2 Amplituden und Signalverbesserung 78
4.3.3 Ein Test: Effektive Massen 82
4.4 4-Quark-Operatoren 82
4.4.1 Ein Versuch mit lokalen Quellen 83
4.4.2 Mögliche Signalverbesserungen 83
4.5 Zusammenfassung 84

5 Zusammenfassung **85**

A γ-Konventionen **87**

B Simulationsparameter **88**

C Jackknife-Fehlerabschätzung **89**
C.1 Naive Fehlerbetrachtung 89
C.2 Der Jackknife-Fehler 89

Kapitel 1

Einleitung

In der Natur wechselwirken die Grundbausteine der Materie, die Leptonen und die Quarks über 4 bekannte Elementarkräfte: Die Elektromagnetische, Schwache, Starke und Gravitations-Wechselwirkung. Während letztere sich bis jetzt einer konsistenten Quantisierung widersetzt [1], lassen sich die ersteren durch lokale Quantenfeldtheorien beschreiben. Grundprinzip dieser Formulierungen ist die Betrachtung von Eichsymmetrien der Lagrangedichten, d. h. die Invarianz der Theorie unter lokalen Eichtransformationen. Die Wechselwirkungen werden durch Austausch von Eichbosonen vermittelt.
Die Elektromagnetische und Schwache Wechselwirkung koppeln an Leptonen und Quarks und können zusammenfassend im elektroschwachen Salam-Weinberg-Modell [1] mit der Eichgruppe $SU(2)_W \times U(1)_Y$ dargestellt werden, wobei die $SU(2)_W$-Eichbosonen ausschließlich an 'linkshändige' Teilchen koppeln, die Parität somit explizit verletzt wird.
In der gegenwärtig vielversprechendsten Beschreibung der Starken Wechselwirkung, der Quantenchromodynamik [2], koppeln masselose Eichbosonen, die Gluonen, an die 'Farbfreiheitsgrade' der Quarks. Die Eichgruppe dieser Theorie ist die 'Farb'-$SU(3)_c$.
Die Überprüfbarkeit und der Erfolg dieser Theorien gründen sich auf deren Renormierbarkeit [3], welche sinnvolle physikalische Vorhersagen erst ermöglicht, indem die in Störungsrechnungen höherer Ordnung auftretenden Divergenzen konsistent durch Redefinition der Massen und Kopplungen absorbiert werden können.
Das Standardmodell der Elementarteilchenphysik beschreibt diese Wechselwirkungen durch eine unter der Produktgruppe $SU(3)_c \times SU(2)_W \times U(1)_Y$ invariante Lagrangedichte. Die Elementarteilchen sind in diesem Rahmen in 3 Familien mit Quarks und Leptonen in den Fundamentaldarstellungen der Eichgruppen eingeteilt. Auf dem Niedrig-Energie-Niveau ist die elektroschwache Eichsymmetrie durch den Higgs-Mechanismus, welcher über den Vakuumerwartungswert von Higgs-Bosonen,

[1] Ansätze in dieser Richtung sind im allgemeinen nicht renormierbar. Renormierbare Theorien, wie z. B. die R^2-Quantengravitation, sind hingegen nicht unitär, deren Vorhersagekraft ist demnach zweifelhaft.

zusätzlichen Skalaren im Standardmodell, zu massiven $SU(2)$-Eichbosonen führt, zur elektromagnetischen $U(1)$-Symmetrie gebrochen. Es verbleibt demnach die $SU(3)_c \times U(1)_{em}$-Eichsymmetrie.
Die aus dem Renormierungsverfahren gewonnenen Renormierungsgruppengleichungen beschreiben über die Callan-Symanzik-β-Funktionen [4] das Laufen der Kopplungskonstanten, d. h. die Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke vom Impulsübertrag. Im Gegensatz zur $U(1)$-Kopplung, welche mit steigender Wechselwirkungsenergie anwächst, sind Wechselwirkungen, welche durch nicht-abelsche Symmetrien beschrieben werden, bis zu einem bestimmten Teilcheninhalt asymptotisch frei [5], d. h mit wachsender Energie verschwindet die Kopplungsstärke. Sie besitzen einen Ultra-Violett-Fixpunkt mit Kopplungsstärke 0.
Viele Rechnungen und Vorhersagen zur Überprüfung der Wechselwirkungsmodelle, wie Streuquerschnitte, Zerfallsbreiten u. ä. können ohne weitere Annahmen oder Modelle nur im Rahmen der Störungstheorie, d. h. in der Entwicklung nach einer notwendigerweise kleinen Kopplungsstärke durchgeführt werden. Während für die elektroschwache Theorie im zugänglichen Energiebereich die Kopplungen ausreichend klein sind und bisher alle perturbativen Präzisionstests im Rahmen der Fehler erfolgreich waren, läßt die laufende QCD-Kopplung α_s nur im Hoch-Energie-Bereich (Multi-GeV) derartige Rechnungen zu. Im Niedrig-Energie-Bereich scheint eine sehr große, nichtperturbative Kopplungsstärke vorzuliegen. Es zeigen sich gebundene Grundzustände, die Hadronen, und Confinement, Quarks können nicht isoliert beobachtet werden.

Quantenfeldtheoretische Rechnungen lassen sich aus der Pfadintegralquantisierung herleiten. Wechselwirkungen sind in diesem Bild als Summe aller mit der exponenzierten jeweiligen Wirkung gewichteten Reaktionspfade zu sehen, die korrespondierenden Funktionale sind jedoch im allgemeinen nicht integrabel. Die Störungstheorie ist in diesem Bild eine Entwicklung des Pfadintegrals in der Kopplungskonstanten. Nach einer auch in perturbativen Rechnungen üblichen Wick-Rotation in den Euklidischen Raum kann die Summation über alle Pfade im Sinne der statistischen Mechanik als Zustandssumme über alle Wahrscheinlichkeiten gesehen werden. In diesem Rahmen ist ein nichtperturbativer Ansatz durch eine stochastische Näherung des Funktionalintegrals möglich. Dies kann geschehen, indem ein Satz von Feldkonfigurationen im statistischen Gleichgewicht generiert wird, auf denen dann Operatorerwartungswerte gemessen werden können.
Die Gitter-QCD [6] verfolgt genau dieses Ziel. Auf einem endlichen Raum-Zeit-Gitter werden mit einer diskretisierten Version der Kontinuumswirkung bei festen Quarkmassen und Kopplung, d.h. festem Gitterabstand a, Feldensembles im statistischen Gleichgewicht erzeugt und QCD-Observable gemessen. Auf diese Weise ist ein Testfeld der QCD im Prinzip ohne zusätzliche Annahmen oder Modelle gegeben: Observable auf dem Gitter können nach in der Praxis notwendigen Extrapolationen in Gitterlänge, -abstand und Quarkmassen mit experimentellen Werten verglichen werden.
Natürlich kann auch dieser Ansatz allein wegen der endlichen physikalischen Gitterlänge aL immer nur Näherung bleiben. Der inverse Gitterabstand, der ultravio-

letten $p < 2\pi/a^{-1}$ und infraroten Impulscutoff $p > 2\pi/(La^{-1})$ festlegt, beschränkt die Gültigkeit der gewählten Diskretisierung der Kontinuumswirkung. Zudem sind weitere Näherungen, wie die Extrapolation von großen Quarkmassen in der Simulation auf die kleinen physikalischen, zu berücksichtigen. Der gegenwärtige Stand der Rechnerkapazitäten scheint bei akzeptabler Statistik und Simulationszeit der vollen QCD nur Gitter bis ca. 64^4 zuzulassen. Um größere physikalische Gitterlängen durch größere Gitterabstände zu erreichen, werden neben der naiven Diskretisierung, der Wilson-Wirkung [6], $O(a)$- oder Symanzik-verbesserte Wirkungen [7], welche Cutoff-Effekte der 1. Ordnung entfernen sollen, verwendet. Simulationen mit perfekten Wirkungen [8],[9] sollen schließlich allgemein irrelevante Kopplungen vermeiden.
Simulationen in der quenched oder Valenzquark-Näherung nähern den fermionischen Teil des Pfadintegrals als Konstante, was dem Grenzwert von Seequarks mit unendlicher Masse entspricht. Analysen in diesem Rahmen führten für das leichte Hadronspektrum und die entsprechenden Matrixelemente auf signifikante Abweichungen zu den experimentellen Werten von $5-10$ Prozent [2]. Von dieser Größenordnung sind demnach, falls die QCD diese Zustände korrekt beschreibt, die Seequarkeffekte dieser Observablen anzunehmen.
Der heutige Stand der Simulationen ist bei der vollen QCD mit 2 dynamischen Fermionen angelangt. Hierunter ist die Berücksichtigung von 2 leichten Seequarks gleicher Masse in der Wirkung des Pfadintegrals zu verstehen. Anschaulich bedeutet dies, daß Effekte von Seequarkloops über die Vakuumkonfigurationen in den Observablen enthalten sind. Hier unternahm bzw. unternimmt die SESAM/TχL-Kollaboration [11], [12] den Versuch, erstmals die volle $N_f = 2$-QCD mit signifikanter Statistik zu simulieren. Der Hauptteil dieser Arbeit besteht aus Analysen dieser Simulationen.
Gegenwärtig wird zudem von den UKQCD- [13] und CP-PACS- [14]-Kollaborationen die Simulation der vollen QCD mit verbesserten Wirkungen in Angriff genommen.

Ziel der SESAM/TχL-Kollaboration als explorative Analyse dynamischer Fermionen ist in erster Linie die Herausarbeitung von qualitativen Unterschieden zur quenched bzw. Valenzquark-Näherung. Neben der Betrachtung des Hadronspektrums [15] ist dann natürlich die Analyse von auf Seequarkloops möglicherweise sensitivere Größen von herausragender Bedeutung.
Von besonderem Interesse sind hier Flavor-Singulett-Observable, die neben Beiträgen von Diagrammen mit zusammenhängenden Quarklinien zusätzlich Beiträge von nichtzusammenhängenden Quarkdiagrammen erhalten und so möglicherweise bessere Testwerkzeuge für den Einfluß von Seequarkloops auf die Struktur des Vakuums sein können. Im Rahmen der Kollaboration wurden bereits der Pion-Nukleon-σ-Term [16] und die axiale Flavor-Singulett-Vektor-Kopplung des Nukleons G_A^1 [17] betrachtet.
Die vorliegende Arbeit setzt ihren ersten Schwerpunkt in der Bestimmung der Masse des Flavor-Singulett-Mesons η' in der vollen QCD. Die im Vergleich zum Mesonoktett sehr hohe experimentelle Masse sollte sich auf dem Gitter in einem großen

[2] 'Finale' Analysen in [10]

Beitrag des bei Oktettmesonen verschwindenden, nichtzusammenhängenden Korrelators widerspiegeln. Theoretisch wird dies durch symmetriebrechende Beiträge topologisch nichttrivialer Eich-Vakuumkonfigurationen begründet. Zentrales numerisches Problem ist die Bestimmung des nichzusammenhängenden Korrelators. Dessen rauschiges Signal erschwert eine Analyse der Masse mit Standardmethoden der Analyse des leichten Spektrums. Erste Analysen in der Valenzquark-Näherung [18] und mit 2 dynamischen Kogut-Susskind-Quarks [19], sowie neuere vorläufige Auswertungen auf $N_f = 2$-Konfigurationen der CP-PACS- [20] und UKQCD-Kollaborationen [21] bestimmten bzw. bestimmen die Masse indirekt aus dem Verhältnis von nichtzusammenhängenden und zusammenhängenden Korrelatoren. In dieser Arbeit wird gezeigt, in welchem Maße der η'-Propagator verbesserten stochastischen Schätzungen zugänglich ist. Die Masse wird dann ohne theoretische Vorurteile mit Standardspektrumsmethoden direkt aus dem η'-Propagator extrahiert. Von Interesse ist natürlich, ob überhaupt Zusammenhänge zwischen der Eichfeldtopologie und den η'-Observablen bestehen.

Ein wichtiger qualitativer Unterschied zwischen Valenzquark-Näherung und voller QCD wird bei der Betrachtung des Potentials eines statischen Quark-Antiquark-Paares erwartet. Der Bindungszustand des statischen Quark-Antiquark-Paares mit endlicher Ausdehnung wird auch als String bezeichnet. Während das Potential in der quenched QCD für große Abstände linear mit der Stringspannung σ wachsen sollte, ist in der vollen QCD durch Effekte von virtuellen Seequarkpaaren oberhalb der Massenschwelle ein Zerfall in 2 Static-Light-Mesonen möglich. Dieses 'Aufbrechen des Strings' wird als String-Breaking bezeichnet. Für große Quark-Antiquark-Abstände sollte demnach ein Abflachen des Potentials auf die Ruheenergie zweier Static-Light-Mesonen beobachtbar sein.

Eine Standardmethode zur Messung des Quark-Antiquark-Potentials ist die Analyse von Wilsonloops, in einer Raumzeitebene geschlossene Verbindungen von Eichfeldlinks. Dieser Operator liefert in der Valenzquark-Näherung beeindruckende Übereinstimmungen mit den erwarteten Potentialverläufen [22], [23]. In Simulationen der vollen QCD wurde jedoch bis heute der für große Abstände erwartete qualitative Unterschied zum Quenched-Potential nicht schlüssig gezeigt. Ein Abflachen des Wilsonloop-Potentials jenseits des aus der Massenschwelle extrahierten Brechungsabstands konnten sowohl die SESAM- [24] und TχL- [25] als auch die UKQCD- [26] und CP-PACS-Kollaboration [27] nicht beobachten. Es wird angenommen [28], daß dies durch einen schlechten Überlapp des Wilsonloop-Operators mit dem 2-Static-Light-Zustand des gebrochenen Strings bedingt ist. Dies legt nahe, den Grundzustand des Potentials aus einer Mischungsanalyse von Quark-Antiquark- und 2-Static-Light-Zustand zu bestimmen [29]. Neben dem Wilsonloop-Operator sind dann 2-Static-Light-Korrelatoren sowie Übergangsmatrixelemente zu beachten. Während in explorativen Analysen dieses Mischungsbild im $SU(2)$-Higgsmodell qualitativ bestätigt werden konnte [30], [31], steht eine vollständige Analyse in der vollen QCD noch aus [32].

Der zweite Schwerpunkt diese Arbeit konzentriert sich in diesem Zusammenhang auf die Betrachtung von, mit Standardtechniken erzielbarer, Signal-Rausch-Verhältnisse der relevanten Operatoren. Zur Signalverbesserung werden Rauschreduktionsmetho-

den untersucht.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

Diskretisierte QCD

In Kapitel 2 werden die Grundlagen von Pfadintegralformalismus und der Gitterformulierung der QCD dargestellt. Es folgt eine Erläuterung der in den SESAM/TχL-Simulationen verwendeten Wilson-Wirkung und der Näherungen des Gitterzugangs. Abschließend werden die Simulationen der SESAM/TχL-Kollaborationen, welche dieser Arbeit zugrunde liegen, detailliert.

η'-Masse in der vollen QCD

Das 3. Kapitel ist der Massenbestimmung des Flavor-Singulett-Mesons η' in der vollen QCD auf SESAM/TχL-Konfigurationen gewidmet. Der Singulett-Propagator erfordert die numerisch aufwendige Bestimmung von 2-Loop-Korrelatoren. Dieser Problematik wird hier besondere Aufmerksamkeit geschenkt. Meßansatz zur Berechnung von Quarkloops ist die Verwendung von Quellen, die durch Volume-Source und lokales Z_2-Rauschen gegeben sind. Ein Vergleich der entsprechenden Signal-Rausch-Verhältnisse auf einem SESAM-Teilsample verdeutlicht die numerischen Probleme. Aufbauend hierauf werden Verbesserungsansätze diskutiert. Es stellt sich heraus, daß mit stochastischen Z_2-Quellen geschätzte, 'geschmierte' Quarkoperatoren auf deutlich stabilere Signale als herkömmliche Ansätze führen. Dies ermöglicht die Bestimmung der η'-Masse mit Standardmethoden der Spektrumsbestimmung. Mit diesem Ansatz wurden zusätzlich Referenzanalysen auf quenched Konfigurationen vergleichbaren physikalischen Gitterabstands durchgeführt. Chirale Extrapolationen dieser Resultate werden mit aus dem Experiment abgeleiteten Daten verglichen.
Über das Index-Theorem werden anschließend aus den Quarkloopdaten Näherungswerte der topologischen Ladung von Vakuumkonfigurationen ermittelt. Diese fermionischen Methoden der Ladungsbestimmung werden mit der Messung nach der gluonischen Methode auf 'gekühlten' Konfigurationen verglichen und zeigen eine recht gute Korrelation.
Von Interesse ist weiter, ob die Verbindung zwischen topologischen Eigenschaften des QCD-Vakuums und η'-Observablen qualitativ hergestellt werden kann. Dies wird auf Subsamples mit definierter topologischer Ladung sowohl für η' als auch für Observable des leichten Hadronspektrums untersucht.

String-Breaking-Matrixelemente

In Kapitel 4 folgt eine Machbarkeitsstudie für eine Analyse des String-Breakings auf den SESAM/TχL-Gittern. Die Beobachtung dieses Phänomens wird im Rahmen

einer Mischungsanalyse von 2 Gitter-Operatoren, Quark-Antiquark- und 2-Static-Light- bzw. 4-Quark-Operator, aufgefaßt.
Der erwartete Brechungsabstand r_b wird aus dem Wilsonloop-Potential und der Massenschwelle zweier Static-Light-Mesonen bestimmt. Es werden Signal-Rausch-Verhältnisse von Wilsonloop-Operator und Übergangsmatrixelementen betrachtet. Als Verbesserungsansatz für die Signalqualität der Übergangsmatrixelemente wird hauptsächlich auf die Verwendung verschmierter Quark-Operatoren eingegangen. Die daraus resultierende Rauschreduktion und mögliche systematische Fehler durch die Verwendung von ausgedehnten Quellen werden betrachtet. Es zeigt sich, daß das Schmieren von Quark-Operatoren ebenfalls stabilere Signale der Übergangsmatrixelemente liefert.

Kapitel 2

Diskretisierte QCD

Gegenstand dieses Abschnitts ist die Darstellung der theoretischen Grundlagen der nachfolgenden Analysen. Nach einem Überblick über den Formalismus der Pfadintegralquantisierung von Quantenfeldtheorien wird die Pfadintegral-Formulierung der starken Wechselwirkung auf dem Gitter, die 'Gitter-QCD' [1], vorgestellt. Insbesondere für den der Störungstheorie unzugänglichen Niederenergiebereich der QCD können in diesem Ansatz im Prinzip ohne zusätzliche Annahmen Aussagen nach 'ersten Prinzipien' getroffen werden. Im weiteren wird die in dieser Arbeit verwendete Standardvariante dieses Zugangs, die Simulation mit der Wilson-Wirkung mit den verschiedenen, in der Praxis notwendigen Näherungen vorgestellt. Zuletzt wird die konkrete Realisierung eines solchen, die 'volle QCD' annähernden 'Computerexperiments' im Rahmen der SESAM/TχL-Kollaboration erläutert. Auf die Analyse dieser Daten stützt sich der Hauptteil dieser Arbeit.

2.1 Pfadintegralquantisierung

Unter den Alternativen zur Quantisierung von Feldtheorien, wie Kanonischer Quantisierung, BRST-Quantisierung usw., bildet der Pfadintegralformalismus [2] einen Ansatz, der auf fundamentalen Prinzipien der Quantenmechanik basiert und im Prinzip auch nichtstörungstheoretische Rechnungen zuläßt.
Grundlegendes Postulat ist hier, daß der Propagation oder Wechselwirkung eines durch das Feld $\phi(x)$ beschriebenen Teilchens eine Übergangsfunktion zuzuordnen ist, die als Pfadintegral, d. h. als Integral über alle mit der jeweiligen exponenzierten Wirkung gewichteten 'Pfade' berechnet werden kann. Zentrale Größe dieser Formulierung ist die Lagrangedichte $\mathcal{L}(\phi(x), \partial_\mu \phi(x))$ der Feldtheorie und die Wirkung $S = \int dx \mathcal{L}$. Analog zur Statistischen Mechanik ergibt sich eine 'Zustandssumme'

[1] Einführungen in [33], [34], [35]
[2] Siehe z. B. [36], [37]

durch ein Funktionalintegral der Felder ϕ

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \; e^{iS[\phi]} \; . \tag{2.1.1}$$

Insbesondere für die Formulierung der Theorie auf einem Gitter wird die Wick-Rotation der Zeitkoordinate, die Transformation in den Euklidischen Raum,

$$x^0 \to -ix^4 \; , \; iS \to -S^E \tag{2.1.2}$$

durchgeführt. Eine mögliche Wahl der γ-Matrizen im Euklidischen ist dann

$$\gamma_4^E = \gamma_0 \; , \; \gamma_j^E = -i\gamma_j \; . \tag{2.1.3}$$

Allgemein lassen sich Erwartungswerte von Operatoren $\mathcal{O}(\phi)$ als Funktionalintegrale darstellen:

$$\langle \mathcal{O}(\phi) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{O}(\phi) e^{iS[\phi]} \to \langle \mathcal{O}(\phi) \rangle_E = \frac{1}{Z_E} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{O}(\phi) e^{-S^E[\phi]} \; . \tag{2.1.4}$$

'Statische Größen', wie Zerfallskonstanten oder Energien von Teilchenzuständen können so im Euklidischen Raum aus der Zeitentwicklung von 'Mehrpunktfunktionen' gewonnen werden. Es entspricht z. B. die 2-Punkt-Funktion

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_f(\phi, x) \mathcal{O}_i(\phi, 0) \rangle &= \frac{1}{Z_E} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{O}_f(\phi, x) \mathcal{O}_i(\phi, 0) e^{-S^E[\phi]} \\ &= \langle 0 | T[\mathcal{O}_f(\phi, x) \mathcal{O}_i(\phi, 0)] | 0 \rangle \end{aligned} \tag{2.1.5}$$

dem zeitgerodneten Produkt von Erzeugungsoperator $\mathcal{O}_i$ und Vernichtungsoperator $\mathcal{O}_f$. Die Operatoren erzeugen bzw. vernichten Linearkombinationen von Zuständen mit den jeweiligen Quantenzahlen der Operatoren. Mit einer Integration über die räumlichen Koordinaten, d.h. der Projektion auf Zustände mit verschwindendem Impuls, läßt sich die Zeitentwicklung der 2-Punkt-Funktion dann in der Basis der Eigenenergiezustände durch

$$\langle 0 | \int dx^3 \mathcal{O}_f(\phi, x) \mathcal{O}_i(\phi, 0) | 0 \rangle = \sum_n \frac{\langle 0 | \mathcal{O}_f | n \rangle \langle n | \mathcal{O}_i | 0 \rangle}{2E_n} e^{-E_n x_4} \tag{2.1.6}$$

beschreiben. Für große Zeiten x_4 läßt sich so der Grundzustand E_1 'herausprojizieren:

$$lim_{x_4 \to \infty} (\langle 0 | \int dx^3 \mathcal{O}_f(\phi, x) \mathcal{O}_i(\phi, 0) | 0 \rangle) = \frac{\langle 0 | \mathcal{O}_f | 1 \rangle \langle 1 | \mathcal{O}_i | 0 \rangle}{2E_1} e^{-E_1 x_4} \; . \tag{2.1.7}$$

2.2 Quantenchromodynamik

Die Quantenchromodynamik beschreibt, ausgehend von der Invarianz der Lagrangedichte unter lokalen $SU(3)$-Eichtransformationen

$$U = exp(ig\theta^a T^a) \; , \; \psi(x) \to U\psi(x) \; , \; \bar{\psi}(x) \to \bar{\psi}(x) U^\dagger \; , \tag{2.2.1}$$

die Wechselwirkung von Quarkfeldern $\psi(x)$ in der fundamentalen Darstellung. Die Generatoren der Algebra lassen sich z. B. durch die Gell-Mann-Matrizen $T^a = \lambda^a/2$ mit Vertauschungsrelationen $[\lambda^a, \lambda^b] = 2if_{abc}\lambda^c$ und Strukturkonstanten f_{abc} darstellen, der Parameter g ist die Eichkopplung. Durch die Einführung von Eichfeldern $A_\mu(x)$ in der adjungierten Darstellung, d.h. durch die Einführung einer Wechselwirkung mit dem Eichfeld, läßt sich die Lagrangedichte der Dirac-Gleichung freier Spinoren

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(x)i\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x) \tag{2.2.2}$$

mittels einer in diesem Sinne kovarianten Ableitung $\partial_\mu \to D_\mu$ mit

$$D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu(x) \ , \ A_\mu(x) = A^a_\mu(x)T^a \tag{2.2.3}$$

verallgemeinern. Die Eichfelddynamik läßt sich dann durch den Feldstärketensor

$$igF_{\mu\nu} = [D_\mu, D_\nu] = ig(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu]) \tag{2.2.4}$$

beschreiben. Der Kommutator $[A_\mu, A_\nu]$ führt für nicht-abelsche Eichgruppen, wie die $SU(3)$, auf Selbstwechselwirkungen der Eichfelder. Für N_f Quarkfelder $\psi_k(x)$ mit Massen m_k erhält man so die eichinvariante QCD-Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \sum_{k=1}^{N_f} \bar{\psi}_k(x)(i\gamma^\mu D_\mu - m_k)\psi(x)_k - \frac{1}{2}Sp(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}) \ . \tag{2.2.5}$$

Im folgenden wird eine spezielle Realisierung dieser Lagrangedichte auf dem Gitter, die Wilson-Diskretisierung [6], vorgestellt.

2.3 QCD auf dem Gitter

2.3.1 Grundlagen

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist ein hyperkubisches 4-dimensionales 'L^3T-Gitter' mit einheitlichem Gitterabstand a und physikalischer räumlicher Ausdehnung $l_s = aL$ sowie zeitlicher Ausdehnung $l_t = aT$. Im allgemeinen wird $T > L$ gewählt, um eine bessere Grundzustandsprojektion in der Zeitentwicklung ohne deutlich größeren Simulationsaufwand zu gewährleisten. Die Umschreibung einer im Kontinuum formulierten Eichtheorie auf ein Gitter bedeutet nun, daß die 'Materiefelder' $\psi_k(x)$ auf den L^3T Gitterpunkten definiert werden

$$\psi(x) \to \psi(x_i) = \psi_x \ , \ x_i \in L^3T \ . \tag{2.3.1}$$

Die Eichfelder $A_\mu(x)$ werden durch den Link $U_\mu(x)$, die Eichfeldverbindung eines Punktes x mit seinem Nachbarn in μ-Richtung ersetzt

$$A_\mu(x) \to U_\mu(x) = \mathcal{P}\left[exp\left(-ig\int_{x+a\hat{\mu}}^{x} dyA_\mu(y)\right)\right] \ . \tag{2.3.2}$$

D.h. man ersetzt das Eichfeld durch sein entsprechendes, pfadgeordnetes ($\mathcal{P}$) Wegintegral. Es gilt für kleine Gitterabstände a demnach

$$U_\mu(x) \simeq 1 + iagA_\mu(x + \frac{1}{2}a\hat{\mu}) + \mathcal{O}(a^2) \ . \tag{2.3.3}$$

Anschaulich betrachtet, bedeutet dann diese Defintion der Eichfelder, daß benachbarte ψ_x eichinvariant verbunden werden können. Je nach Wahl der Gitteroperatoren lassen sich nun im Prinzip unendlich viele diskretisierte Wirkungen konstruieren, die im Kontinuumslimes $a \to 0$ die euklidische Kontinuumswirkung

$$S^E_{QCD} = \int d^4x \left(\sum_{k=1}^{N_f} \bar{\psi}_k(x)(\gamma^E_\mu D_\mu + m_k)\psi_k(x) + \frac{1}{2} Sp[F_{\mu\nu}(x)F_{\mu\nu}(x)] \right) \tag{2.3.4}$$

reproduzieren. Insbesondere lassen sich ohne Einfluß auf den Kontinuumslimes Terme von höherer Ordnung im Gitterabstand zur Wirkung addieren, sodaß eine diskretisierte Wirkung und deren Observable im allgemeinen Diskretisierungsfehler der Ordnung a aufweisen.

2.3.2 Die Wilson-Wirkung

In diesem Abschnitt wird die Kombination der Plaquette-Wirkung der reinen Eichtheorie mit der Wilson-Fermion-Wirkung als Standarddiskretisierung vorgestellt.
Zur Konstruktion der eichinvarianten Eichfeld-Wirkung aus den Link-Variablen U_μ werden pfadgeordnete, geschlossene, d.h. eichinvariante Wege, Wilson-Loops konstruiert. Elementar ist hier der 1×1-Loop, die Plaquette $\Box_{\mu\nu}(x)$.

$$\Box_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x)U_\nu(x + a\hat{\mu})U^\dagger_\mu(x + a\hat{\nu})U^\dagger_\nu(x) \ . \tag{2.3.5}$$

Aus dieser Plaquette läßt sich nun eine Gitterwirkung des $SU(N)$-Eichfeldes mit korrektem Kontinuumslimes und Diskretisierungsfehlern der $\mathcal{O}(a^2)$ definieren:

$$\begin{aligned} S_W[U_\mu(x)] &= \beta \sum_{x,\mu>\nu} \left(1 - \frac{1}{N} Re(Sp[\Box_{\mu\nu}(x)]) \right) \\ &= \int d^4x \frac{1}{2} Sp[F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}] + \mathcal{O}(a^2) \ . \end{aligned} \tag{2.3.6}$$

Der 'Boltzmann-Faktor' β ergibt sich mit der nackten Kopplungskonstante g_0 zu

$$\beta = 2N/g_0^2 \ . \tag{2.3.7}$$

Anzumerken ist, daß die Festlegung der nackten Kopplung implizit die renormierte Kopplung und damit auch die Größenordnung des Gitterabstands festlegt.
Zu dieser Wirkung der reinen Eichtheorie lassen sich durch Addition von irrelevanten Termen, insbesondere durch Linearkombinationen verschiedener Wilson-Loops, verbesserte Versionen mit gleichem Kontinuumslimes bilden. Die den weiteren Betrachtungen zugrunde liegenden SESAM/TχL-Simulationen beschränkte sich jedoch

auf die obige 'Plaquette-Wirkung'.
Zur Konstruktion einer diskretisierten Version der fermionischen Wirkung betrachten wir zunächst die freie fermionische Wirkung im Euklidischen

$$S_f^E = \int d^4x(\bar{\psi}(x)\gamma_\mu^E \partial_\mu \psi(x) + \bar{\psi}(x) m \psi(x)) \ . \tag{2.3.8}$$

Eine Umschreibung erhält man sofort durch Bildung einer symmetrischen 'Gitterableitung'

$$\partial_\mu \to \frac{1}{2a}[\delta_{x,y+a\hat{\mu}} - \delta_{x,y-a\hat{\mu}}] \ , \tag{2.3.9}$$

welche auf die naive, freie Diskretisierung

$$S_f^E = \sum_{x,\mu} \bar{\psi}_x \frac{\gamma_\mu^E}{2a}(\psi_{x+a\hat{\mu}} - \psi_{x-a\hat{\mu}}) + m \sum_x \bar{\psi}_x \psi_x \tag{2.3.10}$$

führt. Der daraus resultierende fermionische Propagator

$$G(p) = \frac{-i\gamma_\mu^E sin(ap_\mu) + ma}{\sum_\mu sin^2(ap_\mu + (am)^2} \tag{2.3.11}$$

besitzt jedoch für $m = 0$ über den physikalischen fermionischen Freiheitsgrad für den Impuls $p = (0,0,0,0)$ hinaus, weitere Pole an den übrigen Rändern der Brillouinzone, auf denen für mindestens eine Impulskomponente $p_\mu = \pi$ gilt, beschreibt also insgesamt $2^d = 16$ fermionische Freiheitsgrade. Dies ist das sogenannte Dopplerproblem.
Eine eichinvariante Version dieser naiven Diskretisierung läßt sich konstruieren, indem man 'benachbarte' Fermionvariable durch eichinvariant 'herantransportierte' Fermionvariable ersetzt:

$$\psi_{x+a\hat{\mu}} \to U_\mu(x)\psi_{x+a\hat{\mu}} \quad , \quad \psi_{x-a\hat{\mu}} \to U_\mu^\dagger(x-a\hat{\mu})\psi_{x-a\hat{\mu}} \ . \tag{2.3.12}$$

Dies ergibt die naive, eichinvariante fermionische Wirkung

$$\begin{aligned} S_f^{naive} &= \frac{1}{2a}\sum_{x,\mu} \bar{\psi}_x \gamma_\mu \left(U_\mu(x)\psi_{x+a\hat{\mu}} - U_\mu^\dagger(x-a\hat{\mu})\psi_{x-a\hat{\mu}}\right) \\ &\quad + m\sum_x \bar{\psi}_x \psi_x \ . \end{aligned} \tag{2.3.13}$$

Problematisch ist die Umformulierung dieser Theorie zur Beschreibung der wirklichen physikalischen Freiheitsgrade.
Der 'Staggered-Fermion'-Ansatz von Kogut und Susskind [38] teilt die Freiheitsgrade auf die jeweils 4 Spinkomponenten von 4 Quarkflavors auf, beschreibt also eine Welt mit 4 Quarks gleicher Masse.
Diese Arbeit und die ihr zugrunde liegenden Simulationen folgen dem Ansatz von Wilson [39], der Fermionterme der Form einer 2. Ableitung zur Wirkung addiert, um so den 15 unphysikalischen Freiheitsgraden Massen der $\mathcal{O}(a^{-1})$ zu geben. Dieser eichinvariante Wilsonterm ist gegeben durch

$$S_f^W = -\sum_{x,\mu} \frac{r}{2a}\bar{\psi}_x \left[U_\mu(x)\psi_{x+a\hat{\mu}} - 2\psi_x + U_\mu^\dagger(x-a\hat{\mu})\psi_{x-a\hat{\mu}}\right] \ , \tag{2.3.14}$$

wobei zu bemerken ist, daß im Kontinuumlimes $a^{-1} \to \infty$ die Massen der Doppler $m_D \sim ra^{-1}$ unendlich werden und von der Theorie entkoppeln. Der Wilsonparameter wird gewöhnlich zu $r = 1$ gesetzt. Dieser Term bricht explizit die chirale Symmetrie der masselosen Kontinuumswirkung, eine Konsequenz des 'No-go'-Theorems von Nielsen und Ninomiya [40], welches besagt, daß es keine lokale Wirkung mit translationsinvariantem und hermitischem zugehörigen Hamiltonian gibt, welche chirale Symmetrie aufweist und frei von Dopplern ist.
Insgesamt ergibt sich so nach Reskalierung der Fermionfelder

$$\sqrt{2\kappa}\psi_x \to \psi_x \tag{2.3.15}$$

mit dem 'Hopping-Parameter' $\kappa \equiv (2am + 8r)^{-1}$ die volle Wilson-Wirkung

$$S = S^W_{gluon} + \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) M_{x,y} \psi(y) \tag{2.3.16}$$

mit der Wilson-Fermionenmatrix

$$M_{x,y} = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu=1}^{4} \left[(r - \gamma_\mu) U_\mu(x) \delta_{x+a\hat{\mu},y} + (r + \gamma_\mu) U^\dagger_\mu(x - a\hat{\mu}) \delta_{x-a\hat{\mu},y} \right] \ . \tag{2.3.17}$$

Für die freie Theorie ergäbe sich demnach eine Quarkmasse

$$m_q a = \frac{1}{2\kappa} - 4r \ . \tag{2.3.18}$$

In der wechselwirkenden Theorie erfährt die Quarkmasse eine additive Renormierung. Es ergibt sich eine Verschiebung des kritischen Hopping-Parameters $1/8r \to \kappa_c$. Dies ist erlaubt, da die Wilson-Wirkung die chirale Symmetrie verletzt. Die Quarkmassen der wechselwirkenden Theorie ergeben sich demnach zu

$$m_q a = \frac{1}{2}(1/\kappa - 1/\kappa_c) \tag{2.3.19}$$

mit einem von den Kopplungen β, r und κ abhängenden, in der Simulation zu bestimmenden κ_c.

2.4 Simulation der vollen QCD

2.4.1 Monte Carlo Simulationen der QCD

Wie oben beschrieben, erlaubt die Formulierung von Eichtheorien auf dem Gitter eine näherungsweise stochastische Integration des euklidischen Pfadintegrals

$$\langle \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) \rangle = \frac{1}{Z^E} \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) e^{-S^E[\bar{\psi}, \psi, U]} \tag{2.4.1}$$

mit der Zustandssumme

$$Z^E = \int \mathcal{D}U\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-S^E[\bar{\psi}\psi,U]} \ . \tag{2.4.2}$$

Die Auswertung dieses Pfadintegrals ist jedoch problematisch: ψ und $\bar{\psi}$ können als Grassmann-Variablen auf dem Gitter nicht dargestellt werden. Die Bestimmung des bilinearen, fermionischen Teils des Pfadintegrals mit N_f Fermionen gleicher Masse $S_f = \sum_k^{N_f} \sum_{x,y} \bar{\psi}_{k,x} M_{x,y} \psi_{k,y}$ wird durch Berechnung des entsprechenden Gauss-Integrals für Grassmann-Variablen, welches die eichfeldabhängige Fermiondeterminante ergibt, ausgeführt

$$\int \mathcal{D}U\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-S_W[\bar{\psi},\psi,U]} \rightarrow \int \mathcal{D}U \ det(M[U])^{N_f} e^{-S^W_{gluon}[U]} \ . \tag{2.4.3}$$

Die Berechnung der Fermiondeterminante als im Gegensatz zur gluonischen Wirkung nichtlokale Größe stellt das eigenliche Rechenzeitproblem in Simulationen der vollen QCD dar, da sie den Rechenaufwand von Simulationen der reinen Eichwirkung um Größenordnungen übersteigt. Frühere Simulationen wurden deshalb fast ausschließlich in der sogenannten Valenzquark- oder quenched Näherung durchgeführt, in der die Determinante konstant $det(M[U]) = const$ gesetzt wird. Dieses schließt die Effekte von Vakuumpolarisationen, d.h. von virtuellen Quark-Antiquark-Paaren bzw. 'Seequarkloops', auf Observable aus.
Die Stochastische Integration geschieht durch Auswertung der Observablen $\mathcal{O}$ auf N_{conf} Vakuum-Konfigurationen und Mittelwertbildung

$$\langle \mathcal{O}(U,\bar{\psi},\psi) \rangle = 1/N_{conf} \sum_i^{N_{conf}} \mathcal{O}_i \ . \tag{2.4.4}$$

Hierzu müssen die Hintergrundeichfelder im 'statistischen Gleichgewicht', also mit dem Wahrscheinlichkeitsmaß

$$d\mathcal{P}(U) \sim \mathcal{D}U det(M[U])^{N_f} e^{-S_g^E(U)} \ , \tag{2.4.5}$$

erzeugt werden. Konfigurationen werden dann mit einem 2.4.5 gewährleistenden Algorithmus in einer Markovkette erzeugt, Messungen von Operatorerwartungswerten auf $\mathcal{O}(100)$ 'statistisch unabhängigen' Konfigurationen durchgeführt.

2.4.2 Systematische Fehler und Extrapolationen

Durch Monte-Carlo-Simulationen ermittelte Operatorerwartungswerte sind im allgemeinen nur in einer Reihe von Näherungen gewonnen. Zum Vergleich mit experimentellen QCD-Daten müssen noch Extrapolationen zur Kontinuumstheorie durchgeführt werden.

Statistische Fehler

Problematisch ist die Formulierung der 'Statistischen Unabhängigkeit' von Konfigurationen. Im Prinzip ist zur Beurteilung für jede Observable eine Autokorrelationsanalyse durchzuführen. Eine naive Fehlerabschätzung von Messungen auf N_{conf} Konfigurationen wird im allgemeinen wegen Autokorrelationen der Konfigurationen nicht den Wert des wahren Fehlers liefern. Zur korrekten Meßfehlerbeurteilung auf einem Konfigurationssample eignen sich vielmehr Verfahren wie Bootstrap- oder Jackknife-Analyse, die Varianzen von Observablen auf einem Satz von Subsamples bestimmen. In dieser Arbeit wird das Jackknife-Verfahren verwendet, das in Anhang B ausführlich beschrieben wird.

Endliches Volumen

Ein Vergleich von Gitterresultaten mit Kontinuumsmeßwerten erfordert im Prinzip eine Finite-Size-Analyse, d.h. einen Test auf systematische Effekte in den Observablen bei Simulationen verschiedener Gittervolumina L^3T. Ein Ansatz in diese Richtung wurde in der SESAM/TχL-Kollaboration durch Simulation des 'leichtesten' SESAM-Hoppingparameters auf Gittern der Größen $16^3 \times 32$ und $24^3 \times 40$ gemacht. Ein Kriterium für Vernachlässigbarkeit von Effekten endlicher Gittergröße läßt sich mit der Korrelationslänge ξ als Inverser der kleinsten auftretenden Energie, d.h. im wesentlichen der π-Masse angeben. Hier sollte mit der Gitterausdehnung L in Gittereinheiten

$$1 \ll \xi \approx 1/m_\pi \ll L \tag{2.4.6}$$

erfüllt sein. Allgemein wird in Simulationen $m_\pi L > 5$ als ausreichend angenommen.

Leichte Quarkmassen

Aufgrund einerseits der benötigten Gitterlänge zum Ausschluß von Effekten endlichen Volumens und andererseits des Aufwands zur Inversion von Fermionpropagatoren sind gegenwärtig keine Simulation mit Quarkmassen im Bereich der physikalischen up- und down-Quarkmassen möglich. Simulationen der vollen QCD werden gemeinhin mit leichten Quarks im Bereich von der Masse des Strange-Quarks bis herunter zu $\mathcal{O}(50MeV)$, d.h. $m_{light} > 1/3 m_{strange}$, durchgeführt. Dies erfordert Simulationen verschiedener 'leichter' Quarkmassen und Extrapolation gemäß Beziehungen der chiralen Störungstheorie zum Bereich physikalischer leichter Quarks. Problematisch kann in diesem Zusammenhang sein, den Gültigkeitsbereich der chiralen Störungstheorie abzuschätzen. Insbesondere beim Vorliegen rauschiger Meßwerte können Extrapolationsansätze nicht eindeutig sein.

Kontinuumslimes?

Gittersimulationen mit festem β und κ legen implizit den Gitterabstand a fest. Der Gitterabstand einer Simulation wird durch Vergleich von hadronischen Observablen, wie ρ-Masse, Nukleonmasse, String-Tension oder π-Zerfallskonstante, in Gittereinheiten mit ihren experimentellen Meßwerten ermittelt.
Zum Vergleich mit experimentellen Werten muß nun eine Kontinuumsextrapolation $a \to 0$ der $\mathcal{O}(a)$-abhängigen Observablen durchgeführt werden, d.h. es müssen Simulationen mit verschiedenen Gitterabständen kombiniert werden. Ohne Bildung des Kontinuumslimes bleibt die Erwartung, durch Betrachtung von Massenverhältnissen, d.h. im Prinzip durch die oben beschriebene Festlegung des Gitterabstands, bei ausreichend kleinem Gitterabstand $a \approx 0.05 - 0.1 fm$ die $\mathcal{O}(a)$-Effekte der jeweiligen Massen annähernd zu kompensieren. Man befindet sich dann im sogenannten Scaling-Fenster, in dem sich für einen Bereich des Gitterabstands nahezu konstante Massenverhältnisse einstellen.

2.4.3 $N_f = 2$-QCD durch SESAM/TχL

Die dieser Arbeit zugrunde liegenden Simulationen der vollen QCD mit 2 'leichten', dynamischen Wilson-Quarks gleicher Masse wurden im Rahmen der SESAM- [3] und TχL- [4] Kollaborationen durchgeführt. Mit dem Hybrid Monte Carlo (HMC) Algorithmus [41], dem Quasi-Standard-Algorithmus für QCD-Simulationen, wurden Konfigurationen mit 2 'Seequarks' gleicher Masse und Kopplung $\beta = 5.6$ generiert. Die Gitterabstände ergaben sich dann zu $a \sim 0.1 fm$, ein Wert, in dem quenched Simulationen beginnendes Skalieren zeigten. Der HMC verlangt zur positiven Definitheit der Fermiondeterminante und damit des Wahrscheinlichkeitsmaßes eine gerade Anzahl gleicher Fermionen. Die physikalische Situation von 3 leichten Quarks unterschiedlicher Masse konnte so nicht dargestellt werden. Auf $16^3 \times 32$-Gittern (SESAM) wurden so Markovketten bei Werten des Hoppingparameters $\kappa = 0.156, 0.1565, 0.157, 0.1575$ und auf $24^3 \times 40$-Gittern (TχL) wurden Konfigurationen mit $\kappa = 0.1575, 0.158$ erzeugt. Für $\kappa = 0.1575$ sind also einfache Tests auf Finite-Size-Effekte möglich. Die gemessenen π-Massen erfüllen im wesentlichen obige Bedingung $m_\pi L \geq 5$. Die Trajektorienlänge betrug jeweils $\mathcal{O}(5000 - 6000)$, wobei die ersten $\mathcal{O}(1000)$ Trajektorien als zur Thermalisierungsphase gehörig verworfen wurden. Unter Beachtung der Autokorrelationszeiten von Spektrumsobservablen, die mit kleinerer Quarkmasse ansteigen, aber dennoch für alle betrachteten Observable im Bereich $\tau_{int} < 50$ Trajektorien blieben, wurden dann $\mathcal{O}(200)$ Konfigurationen mit einem Abstand von ca. 25 Trajektorien als Meßkonfigurationen ausgewählt. Die integrierte Autokorrelationszeit der topologischen Ladung, welche in [42] z.B. für SESAM-$\kappa = 0.1575$ zu $\tau_{int} = 54(4)$ ermittelt wurde, läßt darauf schließen, daß der Instantoninhalt der Konfigurationen durch den HMC

[3] **S**ea Quark **E**ffects in **S**pectrum **A**nd **M**atrix Elements
[4] TχL: **T**owards the **C**hiral **L**imit

ausreichend geändert wurde, das gegebene Konfigurationssample also verschiedene topologische Sektoren repräsentiert. Dies ist von besonderer Relevanz für die η'-Massenbestimmung. Insgesamt wurden somit Simulationen im Bereich der Massenverhältnisse $m_\pi/m_\rho = 0.57, ..., 0.83$ (aus [15]) durchgeführt. Weitere Parameter der Simulationen werden ausführlich in Anhang B dargelegt. Zu bemerken ist hier, daß die Schwelle $m_\pi/m_\rho = 0.5$, welche den Zerfall $\rho \to 2\pi$ zuläßt, nicht unterschritten wurde.
Die Simulationen wurden auf Quadrics APE100 Parallelrechnern der Universität Bielefeld (QH2), des INFN Rom (QH2), des ENEA Casaccia (QH4) und am IfH bzw. DESY Zeuthen (QH4) durchgeführt.

Kapitel 3

η'-Masse in der $N_f = 2$-QCD

Flavor-Singulett-Observable zeigen eine enge Verbindung mit der Struktur des QCD-Vakuums. Zusätzlich zu Diagrammen mit zusammenhängenden Quarklinien tragen nämlich nichtzusammenhängende Quarkdiagramme bei, welche Quantenfluktuationen des Vakuums widerspiegeln.
Im Rahmen der SESAM/TχL Kollaboration wurden bereits in der vollen $N_f = 2$-QCD signifikante Beiträge solcher disconnected Diagramme zu Pion-Nukleon-σ-Term [16] und der axialen Flavor-Singulett-Vektor-Kopplung des Nukleons G_A^1 [17] nachgewiesen.
Diese Kapitel befaßt sich mit der Massenbestimmung des Flavor-Singulett-Mesons η' auf SESAM/TχL-Konfigurationen mit 2 dynamischen Wilson-Fermionen.
Die im Vergleich zum Mesonoktett sehr hohe experimentelle Masse sollte sich auf dem Gitter in einem großen Beitrag des nichtzusammenhängenden Korrelators widerspiegeln. Theoretisch ist dies im Zusammenhang mit der $U_A(1)$-Anomalie durch symmetriebrechende Beiträge topologisch nichtttivialer Eich-Vakuumkonfigurationen begründet. Unabhängig von diesem bis jetzt lediglich in der $1/N_c$-Entwicklung gegebenem quantitativen Zusammenhang wird hier versucht, die η'-Masse mit Standardmethoden der Spektrumsanalyse zu bestimmen. Nach einer theoretischen Einleitung wird der numerisch aufwendigen Bestimmung der 2-Loop-Korrelatoren besondere Aufmerksamkeit geschenkt. Auf einem SESAM-Teilsample werden Signal-Rausch-Verhältnisse von Schätzmethoden wie Volume-Source und Stochastic Estimator Technik verglichen, sowie Verbesserungsansätze, insbesondere die Verwendung von eichinvariant geschmierten Quellen und Senken diskutiert. Die vollständigen Analysen werden dann mit $O(400)$ stochastischen, lokalen und geschmierten Z_2-Quellen pro Konfiguration durchgeführt. Eine quenched Referenzanalyse wird anschließend betrachtet. Die mit Z_2-Rauschen geschätzten Quarkloops werden über das Indextheorem mit aus gluonischen Observablen extrahierten topologischen Ladungen verglichen. Letztendlich wird der qualitative Zusammenhang zwischen η'-Observablen und Eichfeldtopologie durch Betrachtung auf Subsamples unterschiedlicher topologischer Ladung überprüft.

3.1 Einleitung und Theoretische Grundlagen

Die im Vergleich zum Mesonoktett sehr große Masse des η'-Mesons wird gemeinhin als $U(1)$-Problem bezeichnet. Die theoretische Lösung dieser Frage verbindet die zugehörige Brechung dieser $U(1)$-Symmetrie mit topologischen Eigenschaften des Vakuums. Der zum Verständnis von Simulation und Analysen notwendige Hintergrund wird im folgenden kurz dargestellt.

3.1.1 Das $U(1)$-Problem

Der ungebrochene QCD-Lagrangian mit N_f masselosen Quarks

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F^a_{\mu\nu}F^{a\mu\nu} + \sum_{i=1}^{N_f}(i\overline{q}_{iL}\gamma^\mu D_\mu q_{iL} + i\overline{q}_{iR}\gamma^\mu D_\mu q_{iR}) \tag{3.1.1}$$

ist im Flavorraum invariant unter globalen Transformationen der Gruppe

$$SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R \times U(1)_V \times U(1)_A. \tag{3.1.2}$$

In der physikalischen Welt existieren 3 leichte Quarks, sodaß $N_f = 3$ näherungsweise realisiert ist. Darüberhinaus verbleiben auf der hadronischen Ebene nur die $SU(3)_V$-Flavor-Symmetrie und eine $U(1)_V$-Symmetrie, die sich in der Baryonzahlerhaltung äußert. Weitere Symmetrien würden zu einer nicht beobachteten Paritätsverdopplung des leichten QCD-Spektrums führen. Deshalb nimmt man an, daß die chiral symmetrische Theorie spontan gebrochen ist

$$SU(3)_L \times SU(3)_R \to SU(3)_V \tag{3.1.3}$$

und zwar durch den nichtverschwindenden Vakuumerwartungswert des Quarkkondensats, welcher zu massenartigen Termen in der Lagrangedichte führt

$$\langle \overline{q}q \rangle \neq 0. \tag{3.1.4}$$

Das leichte Pseudoskalaroktett wird so mit den gebrochenen Generatoren $SU(3)_L \times SU(3)_R \to SU(3)_V$ in Zusammenhang gebracht und als (Pseudo-) Goldstone-Boson-Oktett identifiziert. Diese a priori masselosen Bosonen erhalten ihre leichten Massen über die relativ kleine, explizite Symmetriebrechung durch Quarkmassenterme:

$$\overline{q}_{iL}q_{iR}m_{qi} \ , i \in \{u, d, s\}. \tag{3.1.5}$$

Genauso kann das η' als leichtester Flavor-Singulett-Pseudoskalar mit dem Goldstone-Boson der gebrochenen $U(1)_A$-Symmetrie identifiziert werden und durch denselben Mechanismus eine leichte Masse erhalten. In der Tat zeigte Weinberg [43], daß dessen Masse in diesem Szenario folgender Bedingung gehorchen muss:

$$m_{\eta'} \leq \sqrt{3}m_\pi. \tag{3.1.6}$$

Die im Verhältnis zum Pseudoskalaroktett große Masse des η' wird deshalb auch als $U(1)$-Problem bezeichnet.

3.1.2 $U(1)_A$-Anomalie und Topologie des Vakuums

Eine Möglichkeit, Weinbergs obige Bedingung zu umgehen, besteht also darin, daß die $U(1)_A$-Symmetrie nicht spontan, sondern z.B. durch eine Anomalie gebrochen ist. Eine nicht spontan gebrochene Symmetrie erfordert kein leichtes Goldstone-Boson, das η' muß keine Masse von der Größenordnung der Oktettmesonmassen besitzen. Es wurde gezeigt, daß Effekte, die auf Instantonen [44], also topologischen Eigenschaften des Vakuums beruhen, auf eine explizite Symmetriebrechung und Wechselwirkungsterme mit den Quantenzahlen eines η'-Massentermes führen können [45], [46], [47] . Ein Zusammenhang mit der Adler-Bell-Jackiw-Anomalie [48] wurde gegeben.
Im folgenden werden für das Verständnis dieser Zusammenhänge grundlegende Begriffe der Topologie eingeführt.
Instantonen sind klassische Lösungen der Eichfeld-Lagrange-Gleichungen. Sie beschreiben Zustände mit lokalen, nichttrivialen Minima der Wirkung. Eine isoliertes Instanton mit endlicher Raum-Zeit-Ausdehnung ρ an x_0 kann durch

$$A^a_\mu(x) = \frac{2}{g}\frac{\eta_{a\mu\nu}(x-x_0)^\nu}{(x-x_0)^2+\rho^2} \tag{3.1.7}$$

beschrieben werden. Der Tensor $\eta_{a\mu\nu}$ bildet hier $SO(4)$-Darstellungen des euklidischen Raumes auf die Darstellungen des Flavorraumes ab, sodaß sich selbstduale Lösungen

$$F^a_{\mu\nu}(x) = \tilde{F}^a_{\mu\nu}(x) \equiv \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}F^{a\rho\sigma}(x) \tag{3.1.8}$$

mit topologischer Windungszahl 1 der Abbildung ergeben. Wichtige Größe in diesem Zusammenhang ist die topologische Ladungsdichte $Q(x)$. Sie stellt die Instantondichte des Vakuums dar

$$Q(x) = \frac{g^2}{32\pi^2}F^{a\mu\nu}(x)\tilde{F}_{a\mu\nu}(x). \tag{3.1.9}$$

Das Raum-Zeit-Integral ergibt die ganzzahlige topologische Ladung Q der Vakuumkonfiguration, die 'Netto-Instanton-Zahl', d. h. die Differenz der Anzahlen von Instantonen und Anti-Instantonen (mit Windungszahl -1)

$$Q = \int dxQ(x) = n_I - n_{\bar{I}} = n \in Z \ . \tag{3.1.10}$$

Im Rahmen des Witten-Veneziano-Ansatzes wird (siehe unten) ein expliziter Zusammenhang zwischen η'-Masse und der sogenannten topologischen Suszeptibilität $\chi(k^2)$ der quenched Theorie gegeben. Sie ist definiert als Integral über die räumlichen Korrelationen der topologischen Ladungsdichten

$$\chi(k^2) = \int dx e^{ikx}\langle 0|TQ(x)Q(0)|0\rangle \ . \tag{3.1.11}$$

Auf dem Gitter mit dem Volumen V transformiert sich dies (für $V \to \infty$) in

$$\chi \equiv \chi(0) = \int dx\langle Q(x)Q(0)\rangle = \langle Q^2\rangle/V \ . \tag{3.1.12}$$

Ausgehend von der Anomaliegleichung [48] des $U_A(1)$-Flavor-Singulett-Stroms

$$\partial_\mu J^{5\mu} \equiv \partial_\mu \sum_{i=1}^{N_f} \bar{\psi}_i \gamma^5 \gamma^\mu \psi_i = 2m \sum_{i=1}^{N_f} \bar{\psi}_i \gamma^5 \psi_i + 2N_f Q(x) \ . \tag{3.1.13}$$

stellten Witten [49] und Veneziano [50] im Rahmen von $1/N_c$-Entwicklungen explizite Relationen zwischen Vakuumtopologie und η'-Masse her. Dieser Ansatz wird im nächsten Abschnitt diskutiert.
Die Anomaliegleichung verbindet explizit gluonische und fermionische Observable. Anschaulich ist ein Instanton als 'flavordemokratische' Senke von N_f linkshändigen und Quelle von N_f rechtshändigen Quarks für eine Chiralitätsänderung um $2N_f$ verantwortlich. Auf dem Gitter mit periodischen Randbedingungen ergibt sich aus der Raumzeit-Integration dieser Gleichung ein Zusammenhang zwischen topologischer Ladung des Vakuums und der Spur über den Quarkloop mit Quarkmasse m_q [1]

$$Q = \kappa_P \frac{m_q}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \langle \psi_i \gamma^5 \bar{\psi}_i \rangle = \kappa_P m_q Sp(\gamma_5 M^{-1}) \ . \tag{3.1.14}$$

Mit dieser fermionischen Methode ist eine Möglichkeit zur Bestimmung der topologischen Ladung der Vakuumkonfiguration gegeben, auf die am Ende dieses Kapitels näher eingegangen werden wird. Denn: Über das Atiyah-Singer-Index-Theorem [51] ist die topologische Ladung einer Eichfeldkonfiguration mit der Anzahl $N_{R,L}$ der links- und rechtshändigen Nullmoden des Dirac-Operators verbunden. Betrachtet man nämlich in der orthonormalen Eigenfunktionensbasis ϕ_s des Dirac-Operators mit Eigenwerten λ_s

$$\gamma_\mu D^\mu \phi_s = i\lambda_s \phi_s \ , \ \lambda_s = \lambda_s^* \ , \tag{3.1.15}$$

die Spur des Fermionloops

$$Q = m_q Sp(\gamma_5 \frac{1}{\gamma_\mu D^\mu + m_q}) = m_q \sum_s \frac{\phi_s^\dagger \gamma_5 \phi_s}{i\lambda_s + m_q} \ , \tag{3.1.16}$$

so tragen tragen nur die Nullmoden mit Chiralität $\gamma_5 \phi_{R,L} = \pm \phi_{R,L}$ zur Summe bei. Die anderen Summanden verschwinden, da mit $\{\gamma_5, \gamma_\mu D^\mu\} = 0$ für $\lambda_s \neq 0$ folgt:

$$(\phi_s^\dagger \gamma_\mu D^\mu)\gamma_5 \phi_s = -\phi_s^\dagger (\gamma_\mu D^\mu \gamma_5 \phi_s) \rightarrow \phi_s^\dagger \gamma_5 \phi_s = 0 \ . \tag{3.1.17}$$

Hieraus ergibt sich eine Formulierung des Atiyah-Singer-Index-Theorems:

$$Q = N_R - N_L \ . \tag{3.1.18}$$

Smit und Vink [52], sowie Itoh et al. [53] zeigten die zumindest approximative Gültigkeit von 3.1.18 auf dem Gitter.
Die Verbindung von Nullmoden, Topologie und η'-Masse legt die Vermutung nahe, daß der disconnected Korrelator im wesentlichen durch die niedrigen Eigenmoden des Dirac-Operators bestimmt wird. Erste vielversprechende Ansätze in dieser Richtung wurden bereits auf SESAM-Gittern mit $\kappa = 0.1575$ ausgeführt [54].

[1] Mit Gitterrenormierungskonstante κ_P

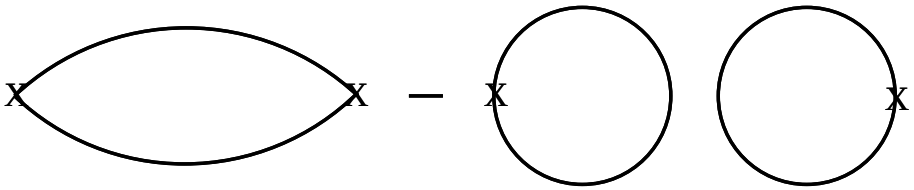

Abbildung 3.1: η'-Propagator: Connected und disconnected Diagramme

3.1.3 Der Witten-Veneziano-Ansatz

Herrschende theoretische Auffassung ist, daß die große η'-Masse durch einen Beitrag der $U(1)_A$-Anomalie entsteht. Im Singulett-Propagator (siehe Abb. 3.1) treten zusätzliche nichtzusammenhängende Quarkloopkorrelatoren auf, welche für die Oktettpropagatoren wegen der Spurfreiheit der Generatoren verschwinden. Durch einen nichtstörungstheoretischen Beitrag der $U(1)_A$-Anomalie können diese 'disconnected' Diagramme dann unter Verletzung der Zweig-Regel einen wesentlichen Beitrag zur η'-Masse liefern. Eine explizite Herleitung in diesem Sinne geben Witten und Veneziano[49], [50] an. Sie führen eine $1/N_c$-Entwicklung durch, wobei der Anomaliebeitrag von $O(1/N_c)$ für endliches N_c zum Singulett-Oktett-Massensplitting führt. Im Limes $N_c \to \infty$ verschwinden Anomalie und Splitting, das η' wird zum leichten Goldstone-Boson der spontan gebrochenen $U_A(1)$-Symmetrie. In [50] folgt dieses umittelbar aus chiralen Ward-Identitäten im Zusammenhang mit der Anomaliegleichung des $U_A(1)$-Flavor-Singulett-Stroms 3.1.13. Um diese zu erfüllen, ist in der $1/N_c$-Entwicklung die Existenz eines Mesonzustandes mit Massenquadrat der Ordnung $O(1/N_c)$ erforderlich, welches mit dem η' identifiziert wird. Die große Masse entstünde in diesem Modell durch das Koppeln von Geistfeldern, einerseits an den mit der topologischen Ladungsdichte zusammenhängenden Eichfeldstrom und andererseits an den Singulettstrom. Dieses impliziert eine effektive Kopplung der virtuellen Quarkloops mit Kopplungsstärke m_0^2. Für den Propagator des η' bedeutet dies: Die Fouriertransformierte des Oktett-Meson-Korrelators $\langle OM(t)OM(0)\rangle$,

$$G_{OM}(p^2) \sim \frac{1}{p^2 + m_{OM}^2} \tag{3.1.19}$$

wird im Flavor-Singulettfall durch virtuelle Quarkloops mit Kopplungstärke $m_0^2 \sim O(1/N_c)$ modifiziert. Der resultierende η'-Propagator, die Summe aller Ordnungen von m_0^2, kann als geometrische Reihe geschrieben werden

$$\begin{aligned} G_{\eta'}(p^2) &\sim \frac{1}{p^2 + m_{OM}^2} \sum_{n=0}^{\infty} (-\frac{m_0^2}{p^2 + m_{OM}^2})^n \\ &\sim \frac{1}{p^2 + m_{OM}^2 + m_0^2} \ . \end{aligned} \tag{3.1.20}$$

Die Verschiebung des Massepols ist durch die Kopplungsstärke gegeben und wird definiert als

$$m_0^2 \equiv m_{\eta'}^2 - m_{OM}^2 \simeq m_{\eta'}^2 + m_\eta^2 - 2m_K^2 \simeq (.860 GeV)^2 \ . \tag{3.1.21}$$

Die physikalische Welt ist natürlich nicht $SU(3)$-symmetrisch, weshalb m^2_{OM} als Mittel über die leichten Oktettmassenquarate genommen wird:

$$m^2_{OM} \simeq (4m^2_K + 3m^2_\pi + m^2_\eta)/8 \ . \tag{3.1.22}$$

Anzumerken ist, daß in diesen Betrachtungen die η'-η-Mischung vernachlässigt wurde.
Die Kopplungstärke hängt in diesem Szenario mit der topologischen Suszeptibilität des Vakuums der reinen (quenched) Eichtheorie über die 'Witten-Veneziano Massen-Formel' zusammen

$$m^2_0 = 2N_f \frac{\chi(0)_{qu}}{f^2_\pi} \ . \tag{3.1.23}$$

Dieser Zusammenhang wurde aus der Betrachtung der Vakuum-Energiedichte der reinen Eichtheorie gewonnen. Diese kann im Prinzip von einem, die Überlagerung verschiedener topologisch inäquivalenter Vakua beschreibenden, 'θ-Winkel' abhängen. In der vollen QCD muß diese Abhängigkeit verschwinden, Seequarkeffekte müssen dazu im Rahmen der $1/N_c$-Entwicklung auf einen intermediären Massenzustand nach Gl. 3.1.23 führen.
Zu beachten ist, daß im Witten-Veneziano-Modell die Kopplungsstärke m^2_0 linear von der Anzahl N_f der 'aktiven', d. h. 'leichten' Quark-Flavors abhängt. Im Rahmen dieses Ansatzes können also Extrapolationen von der physikalischen Welt mit $N_f = 3$ auf unsere unphysikalische SESAM/TχL-QCD mit $N_f = 2$ durchgeführt werden. Dies geschieht analog zur 'Partially Quenched Chiral Perturbation Theory' von Bernard und Golterman [55] und wird weiter unten vorgestellt. Ein Versagen dieser Extrapolation kann also neben methodischen und Gitterfehlern durch eine Nichtlinearität der Abhängigkeit von der Anzahl dynamischer Quarks bedingt sein. Ein alternativer Ansatz ist die Betrachung des η' in einer lediglich $SU(2)$-Isospin-symmetrischen '2 + 1-Basis' [56]. Diese Betrachtungsweise wird hier jedoch nicht näher verfolgt.

3.2 Observable auf dem Gitter

In diesem Abschnitt werden die relevanten η'-Observablen auf dem Gitter dargestellt. Die Unterschiede in den Analysen von voller und quenched QCD werden herausgestellt.

3.2.1 Der η'-Propagator

Das η' erhält, wie oben beschrieben, als Flavor-Singulett-Meson Beiträge zum Propagator durch nichtzusammenhängende, 'disconnected' Quarkdiagramme, welche im Oktettfall wegen der Spurfreiheit der Generatoren verschwinden.
Mit dem η'-Operator

$$\eta'(x) = c \sum_{i=1}^{N_f} \overline{q}_i(x)\gamma_5 q_i(x) \ , \tag{3.2.1}$$

ist der η'-Propagator

$$G_{\eta'}(0|x) := \langle 0|T(\eta'^{\dagger}(0)\eta'(x))|0\rangle \tag{3.2.2}$$

nach Ausführung der Wick-Kontraktionen explizit gegeben durch (vgl. Abb. 3.1)

$$\begin{aligned} G_{\eta'}(0|x) &= |c|^2\langle 0|T(\sum_{i=1}^{N_f}\overline{q}_i\gamma_5 q_i(0)^{\dagger})(\sum_{j=1}^{N_f}\overline{q}_j\gamma_5 q_j(x))|0\rangle \\ &= |c|^2\sum_{i,j=1}^{N_f}[Sp(\gamma_5\delta_{ij}M^{-1}(0|x)\gamma_5 M^{-1}(x|0)) \\ &\quad -Sp(\gamma_5\delta_{ii}M^{-1}(0|0))Sp(\gamma_5\delta_{jj}M^{-1}(x|x))] \ . \end{aligned} \tag{3.2.3}$$

Hierbei wird die Spur über Farb- und Dirac-Indizes genommen und der Quark-Propagator mit Flavor- (i,j), Farbe- (a,b) und Dirac- (α,β) Indizes ist gegeben durch

$$\langle 0|q^a_{i\alpha}(x)\overline{q}^b_{j\beta}(0)|0\rangle = \delta_{ij}(M^{ab}_{\alpha\beta})^{-1}(0|x). \tag{3.2.4}$$

Unter Ausnutzung der Identität

$$(M^{-1}(0|x))^{\dagger} \equiv \gamma_5 M^{-1}(x|0)\gamma_5 \tag{3.2.5}$$

erhält man weiter

$$\begin{aligned} G_{\eta'}(0|x) &\sim N_f Sp((M^{-1}(0|x))^{\dagger}M^{-1}(0|x)) \\ &\quad -N_f^2 Sp(\gamma_5 M^{-1}(0|0))^{\dagger}Sp(\gamma_5 M^{-1}(x|x)) \ . \end{aligned} \tag{3.2.6}$$

Den Propagator für verschwindenden Impuls erhält man durch Integration über die Raumkomponenten

$$G_{\eta'}(0|t) = \int dx^3 G_{\eta'}(0,0|x,t) \ . \tag{3.2.7}$$

3.2.2 η' in der vollen QCD

Aus dem Propagator können natürlich ohne 'theoretische Vorurteile' direkt η'-Massen extrahiert werden.
Interessant ist jedoch auch die Betrachtung im Witten-Veneziano-Bild. In diesem Rahmen beinhaltet die 'Summe' der connected und disconnected Operatoren in der 'vollen' $N_f = 2$-QCD wegen der im Pfadintegral berücksichtigten Seequarkloops sämtliche Terme der Reihe 3.1.20, man erhält den vollen η'-Propagator. Geeignete Observable ist demnach in jedem Fall der η'-Propagator:

$$G(t) \equiv \langle\eta'(t)\eta'(0)\rangle_{conn} - \langle\eta'(t)\eta'(0)\rangle_{disc} \to exp(-m_{\eta'}t) \ . \tag{3.2.8}$$

Ein anderer Ansatz ist die Extraktion der Massendifferenz von η' und Oktettmesonen aus dem Verhältnis $R(t)$ der beiden Amplituden. Diese Observablen sind hier

ebenfalls zum Vergleich [2] angegeben, gehen aber nicht in unsere Massenfits, sondern lediglich in Konsistenzchecks unserer Ergebnisse ein. Fitansatz wäre hier für $0 \ll t \ll T/2$

$$R(t) \equiv \frac{\langle \eta'(t)\eta'(0)\rangle_{disc}}{\langle \eta'(t)\eta'(0)\rangle_{conn}} \to 1 - B\frac{exp(-m_{\eta'}t)}{exp(-m_{OM}t)} = 1 - Bexp(-\Delta mt) \ . \qquad (3.2.9)$$

Auf unseren Gittern mit periodischen Randbedingungen gelten diese Fitansätze nur für kleine Zeitschichten, sodaß in den Fits folgende Ansätze verwendet wurden:

$$\begin{aligned} G(t) &\to exp(-m_{\eta'}t) + exp(-m_{\eta'}(T-t)) \qquad (3.2.10) \\ R(t) &\to 1 - B\frac{exp(-m_{\eta'}t) + exp(-m_{\eta'}(T-t))}{exp(-m_{OM}t) + exp(-m_{OM}(T-t))} \ . \end{aligned}$$

3.2.3 η' in der quenched Näherung

In der quenched Näherung sind virtuelle Quarkloops nicht in den Observablen enthalten.
Im Rahmen des Witten-Veneziano-Bildes bedeutet dies, daß lediglich die ersten beiden Terme der Summe 3.1.20 auftreten, die Differenz der 1-Loop and 2-Loop Amplituden also nicht den vollen Propagator, sondern einen Doppelpol ergibt. Geeignete Observable in dieser Näherung ist hier das Verhältnis der beiden Amplituden

$$R(t) \equiv \frac{\langle \eta'(t)\eta'(0)\rangle_{disc}}{\langle \eta'(t)\eta'(0)\rangle_{conn}} \to R_0 + \frac{m_0^2}{2m_{OM}}t \ , \ 0 \ll t \ll T/2. \qquad (3.2.11)$$

Die angegebene Zeitabhängigkeit folgt aus komplexer Integration und gilt für große Zeiten. Analysen dieses Typs wurden von Kuramashi [18] und Kilcup [19] durchgeführt.

3.3 Berechnung des connected Korrelators

Der η'-Propagator setzt sich nach 3.2.3 aus dem zusammenhängenden, 'connected', und dem nichtzusammenhängenden, 'disconnected' Anteil zusammen. Während die Bestimmung des disconnected Korrelators die eigentliche numerische und methodische Herausforderung dieser Arbeit darstellt, ist der connected Korrelator im wesentlichen durch den π-Propagator der Spektrumsanalyse gegeben. Die Standardmethodik der Berechnung des Letzteren wird im folgenden erläutert.

[2] In [18], [19], [20] und [21] werden allein aus dieser Observable η'-Massen bestimmt.

3.3.1 Der connected Korrelator

Im Allgemeinen werden Elemente von Wilson-Fermion-Propagatoren aus der (numerischen) Lösung der Gleichung

$$\sum_x M(y,x)\xi(x) = \phi(y) \rightarrow \xi(x) = \sum_y M^{-1}(y,x)\phi(y) \ , \tag{3.3.1}$$

mit dem Quellvektor ϕ und der Wilson-Matrix M bestimmt.
Die Berechnung des zusammenhängenden Anteils des η'-Propagators

$$\langle \eta'(t)\eta'(0)\rangle_{conn} \sim \sum_{x\in L^3} Sp((M^{-1}(0,0|x,t))^\dagger M^{-1}(0,0|x,t)) \tag{3.3.2}$$

mit der Spur über Color- und Dirac-Indizes wird durch Wahl einer Punktquelle in Gittermitte und Inversionen auf dessen 12 Color-Dirac-Komponenten realisiert. Auf diese Weise lassen sich OM-Propagatoren relativ genau berechnen (vergl. Abb. 3.2 oben). Die Translationsinvarianz des OM-Operators legitimiert die spezielle Wahl des Quellpunktes.

3.3.2 Geschmierte Operatoren

Als Standardtechnik zur Verbesserung von Grundzustandssignalen in hadronischen Korrelationsfunktionen hat sich das eichinvariante 'Wuppertal-Smearing' [66] etabliert. Hierbei wird die Quelle/Senke ϕ im Raum 'verschmiert', indem iterativ auf jedem Punkt ein gewichteter Mittelwert mit den eichinvariant 'herantransportierten' räumlichen Nachbarn gebildet wird:

$$\phi(x) \rightarrow \frac{1}{1+6\alpha}[\phi(x) + \alpha \sum_{i=1}^{3} U_i(x)\phi(x+\hat{i}) + U_i^\dagger(x-\hat{i})\phi(x-\hat{i})] \ . \tag{3.3.3}$$

Diese Prozedur wird N_{sm}-fach iteriert. Dieses Verfahren liefert eine räumliche Ausweitung der Quelle mit 'gaußartig' abfallender Amplitude. Anschaulich ist dies durch Anwendung einer Smearing-Matrix $F(x,y)$ auf die ursprüngliche Quelle $\phi(y)$

$$\tilde{\phi}(x) = \sum_y F(x,y)\phi(y) \ , \tag{3.3.4}$$

zu verstehen, welche die Quelle eichinvariant auf Nachbarpunkte transportiert. Die Inversion auf einer geschmierten Quelle liefert dann für die Senken x

$$\sum_x M(y,x)\xi(x) = \tilde{\phi}(y) \rightarrow \xi(x) = \sum_{y,z} M^{-1}(y,x)F(y,z)\phi(z) \ , \tag{3.3.5}$$

also eine gewichtete Summe der Propagatoren von den Punkten y, welche eichinvariant mit den ursprünglichen Quellpunkten z verbunden sind. Das Verschmieren der Senken liefert dann

$$\sum_x F(v,x)\xi(x) = \sum_{x,y,z} F(v,x)M^{-1}(y,x)F(y,z)\phi(z) \ . \tag{3.3.6}$$

Für Punktquellen ist $\phi(z) = \delta_{z,z_0}$ und der connected Korrelator ergibt sich analog zu 3.3.2 mit $z_0 = 0$ zu

$$\langle \eta'(t)\eta'(0)\rangle_{conn} \sim \sum_{v,x,y\in L^3} Sp(|F(v,t|x,t)M^{-1}(y,0|x,t)F(y,0|0,0)|^2) \ . \qquad (3.3.7)$$

Aus den SESAM-Spektrumsfits [15] wurde hier der Parameterwert $\alpha = 4.0$ übernommen. Die Anzahl der Iterationen wurde zu $N_{sm} = 25$ gewählt. Diese Parameterwahl führt auf mittlere Quellradien von ≈ 3 Gittereinheiten.
In dieser Untersuchung verwenden wir neben den lokalen Operatoren (local-local, 'll') auch Operatoren mit 'Wuppertal-geschmierten' Quellen und Senken (smeared-smeared, 'sm') und obigen Parameterwerten. Diese führen, wie unten gezeigt werden wird, auf deutlich verläßlichere Signale für die zu extrahierenden Grundzustände.

3.4 Der disconnected Korrelator

Die Berechnung des disconnected Anteils des η'-Propagators

$$\langle \eta'(t)\eta'(0)\rangle_{disc} \sim \sum_{x\in L^3} Sp(\gamma_5 M^{-1}(0,0|0,0))^\dagger Sp(\gamma_5 M^{-1}(x,t|x,t)) \qquad (3.4.1)$$

mit der Spur über Color- und Dirac-Indizes erfordert auf $L^3 * T$-Gittern die Berechnung der räumlichen Summe über die Quarkloops

$$\sum_{x\in L^3} Sp(\gamma_5 M^{-1}(x,t|x,t)) \qquad (3.4.2)$$

und damit im Prinzip Inversionen auf allen $3*4*L^3*T$ Color-Dirac-Raumzeitpunkten. Dies ist natürlich bei unseren Gittergrößen (SESAM $16^3 \times 32$, TXL $24^3 \times 40$) bei weitem nicht durchführbar. Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung dieses Ausdrucks sind einerseits die 'Volume-Source-Methode' und andererseits die Verwendung stochastischer Inversionsverfahren.
In diesem Abschnitt werden diese Verfahren vorgestellt, um geschmierte Operatoren erweitert und auf dem $\kappa = 0.157$-SESAM-Gitter und quenched Konfigurationen verglichen. Anschließend werden Methodik und Statistik unserer Analyse vorgestellt, sowie die Abhängigkeit des statistischen Fehlers der Schätzwerte von der Anzahl der verwendeten stochastischen Quellen evaluiert.

3.4.1 Die Stochastic-Estimator-Technik (SET)

Die Standardvariante der Stochastic-Estimator-Technik (SET) beruht auf voll besetzten Quellvektoren mit stochastischen, komplexen Einträgen. Im Mittel über N_{est} stochastische Quellvektoren ϕ^a erfüllen deren Einträge $\phi(x)$ für $N_{est} \to \infty$ folgende Bedingungen:

$$\langle \phi(x)\rangle \equiv \frac{1}{N_{est}} \sum_{a=1}^{N_{est}} \phi^a(x) \to 0 \ , \ \langle \phi(x)^\dagger \phi(y)\rangle \to \delta_{x,y} \ . \qquad (3.4.3)$$

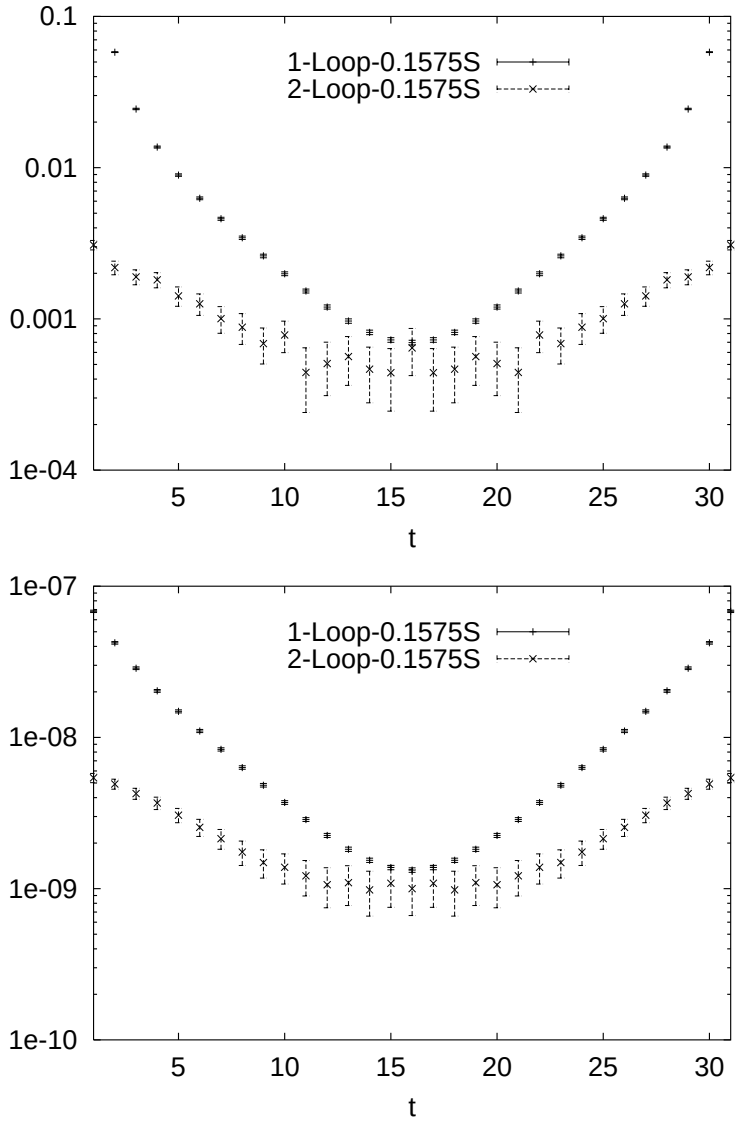

Abbildung 3.2: Korrelationsfunktionen ($\kappa = 0.1575$), lokal (oben) und geschmiert

Elemente der inversen Matrix $M^{-1}(y,x)$ lassen sich so über

$$\langle \phi(y)^\dagger \xi(x) \rangle = \sum_z M^{-1}(z,x) \langle \phi(y)^\dagger \phi(z) \rangle \to M^{-1}(y,x) \tag{3.4.4}$$

bestimmen.
Gegenüber den ersten Ansätzen mit Gauss-verteilten Einträgen [58] zeigt die Variante mit komplexem 'Z_2-Rauschen' [59] per Konstruktion fehlende Rauschterme auf den Diagonalelementen und wird im folgenden näher betrachtet.

Diagonal-verbessertes Z_2-Rauschen

Quellen mit (komplexem) Z_2-Rauschen erfüllen zusätzlich für beliebiges N_{est} exakt

$$\langle \phi(x)^\dagger \phi(x) \rangle = 1 \ , \tag{3.4.5}$$

sodaß sich 3.4.4 in 'exakte' und Rauschterme aufteilen läßt

$$\langle \phi(y)^\dagger \xi(x) \rangle = M^{-1}(y,x) + \sum_{z \neq y} M^{-1}(z,x) \langle \phi(y)^\dagger \phi(z) \rangle \ . \tag{3.4.6}$$

Wilson-Quarkpropagatoren zeigen im wesentlichen exponentiellen Abfall außerhalb der Diagonalen, weshalb man die wesentlichen 'Fehlerterme' in 3.4.6 als durch die 'Diagonalelemente' $M^{-1}(x,x)\langle \phi(y)^\dagger \phi(x) \rangle$ gegeben ansehen kann. Eine Möglichkeit zur Signalverbesserung der Nichtdiagonalelemente besteht so darin, diese Terme explizit herauszurechnen [60]

$$\langle \phi(y)^\dagger \xi(x) \rangle - M^{-1}(x,x) \langle \phi(y)^\dagger \phi(x) \rangle = M^{-1}(y,x) + \sum_{z \neq x,y} M^{-1}(z,x) \langle \phi(y)^\dagger \phi(z) \rangle \ . \tag{3.4.7}$$

Im Rahmen unserer Analyse sind nichtdiagonale Elemente im Spinraum für die Rechnung von $Sp(\gamma_5 M^{-1})$ zu bestimmen, während im Color- und Ortsraum lediglich Diagonalelemente von Interesse sind. Die Diagonalverbesserung beschränkt sich hier also auf den Spinraum. Die a priori natürlich nicht bekannten Diagonalelemente $M^{-1}(x,x)$ werden hier durch die bereits für kleines N_{est} recht stabilen Schätzwerte genähert. Im Rahmen der SESAM-Kollaboration wurden mit dieser und ähnlichen Methoden Machbarkeitsstudien und Analysen von anderen Flavor-Singulett-Observablen, wie dem chiralen Kondensat [61], dem Pion-Nukleon-σ-Term [16] und der Axialen Kopplung des Protons [17], [62] [3] durchgeführt.

Mittelung über das Gitter

Der 2-Loop-Korrelator wurde unter Ausnutzung der Translationsinvarianz als 'gleitendes Mittel' über das jeweilige Gitter berechnet

$$\begin{aligned} \langle \eta'(t)\eta'(0) \rangle_{disc} \ \sim \ & \frac{1}{L^3 * T} \sum_{\tau=1}^{T} \Big(\sum_{y \in L^3} Sp(\gamma_5 M^{-1}(y,\tau|y,\tau))^\dagger \Big) * \\ & \Big(\sum_{x \in L^3} Sp(\gamma_5 M^{-1}(x,\tau+t|x,\tau+t)) \Big) \ . \end{aligned} \tag{3.4.8}$$

Dies beinhaltet zwar gegenüber dem 1-Loop-Korrelator eine zusätzliche Mittelung über $L^3 \times T$ Gitterpunkte, führt aber trotzdem nicht auf ähnliche statistische Qualität, wie Abb. 3.2 zeigt. Hier werden 1-Loop- und SET-2-Loop-Korrelatoren für lokale und geschmierte Operatoren auf einem $16^3 \times 32$ Gitter bei der Quarkmasse $\kappa = 0.1575$ verglichen.

[3] Ausführlichere Zusammenfassungen in [63], [64], [65].

3.4.2 Die Volume-Source-Methode

Die Volume-Source- oder Wall-Source-Methode wurde bzw. wird in [18] und [20] zur η'-Analyse verwendet Es wird mit 12 'color-spin-expliziten' Inversionen der Quarkpropagator mit 'Einheits-Quellen' auf allen Raumzeitpunkten r_s ohne Eichfixierung berechnet [4].

$$\phi(r_s, c_s, d_s) = 1, \forall r_s;\ \phi(r_s, c, d) = 0, c \neq c_s, d \neq d_s\ . \tag{3.4.9}$$

Der analog zu 3.3.1 berechnete Propagator läßt sich in lokale Signal- und nichtlokale Rauschterme aufteilen:

$$\begin{aligned} \xi(r,c,d) &\equiv \sum_{r_s \in L^3 * T} M^{-1}(r,c,d|r_s,c_s,d_s) \\ &= M^{-1}(r_s,c,d|r_s,c_s,d_s) + \sum_{r_s \neq r} M^{-1}(r,c,d|r_s,c_s,d_s)\ . \end{aligned} \tag{3.4.10}$$

Man erhält so $M^{-1}(r_s, c, d|r_s, c_s, d_s)$ unter der Annahme, daß sich der Rauschterm aus nichtlokalen, nichteichinvarianten Beiträgen im Mittel über die Eichkonfigurationen durch deren 'zufällige' Phasen wegmittelt.
Nachteil dieses Ansatzes ist, daß die Projektion auf die gewünschten Elemente nicht wie bei der Stochastic-Estimator-Technik durch Erhöhung der Quellvektoranzahl auf jeder einzelnen Konfigurationen mit praktisch beliebiger Genauigkeit erreicht werden kann, sondern nur über eine Erhöhung der betrachteten Konfigurationsanzahl zu bewerkstelligen ist.
In [20] wurden diese Inversionen auf jeder Trajektorie des Ensembles ausgeführt, um so den Rauschterm durch eine höhere Eichfeldstatistik zu unterdrücken. Fraglich ist jedoch, ob diese korrelierten Konfigurationen diesen Zweck effektiv erfüllen, zumal die benötigte Anzahl an Inversionen in der Größenordnung unserer Stochastic-Estimator-Analysen auf dekorrelierten Konfigurationen liegt. Wilcox [57] gibt jedoch an, daß gerade im pseudoskalaren Kanal eine Volume-Source-Analyse der entsprechenden Stochastischen Estimation mit gleicher Anzahl an Inversionen überlegen sei. Zur Klärung dieser Frage wurden Volume-Source-Inversionen auf SESAM-Konfigurationen mit $\kappa = 0.157$ für lokale und geschmierte Operatoren, sowie auf dem quenched Ensemble für geschmierte Operatoren und verschiedene Valenz-Quarkmassen durchgeführt.
Ein Vergleich dieser Signale mit den stochastischen Inversionsverfahren wird im übernächsten Abschnitt dargestellt.

3.4.3 Geschmierte Operatoren

Die Verwendung geschmierter stochastischer Quellen oder Volume Sources zur Messung von $Sp(\gamma_5 M^{-1})$ bedarf der Erläuterung. Bei der Verwendung lokaler Quellen

[4] Zur besseren Übersichtlichkeit werden hier die Koordinaten x in Orts- r_s, Color- c_s und Spinraumkoordinaten d_s aufgeteilt

wird auf im Color- und Ortsraum diagonale Elemente projiziert

$$\langle \phi(x)^\dagger \xi(x) \rangle = \sum_z M^{-1}(z,x) \langle \phi(x)^\dagger \phi(z) \rangle \to M^{-1}(x,x) \ . \tag{3.4.11}$$

Diese Fermion-Loops sind offensichtlich eichinvariant. Bei der Verwendung geschmierter Quellen ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \phi(x)^\dagger \xi(x) \rangle &= \sum_z M^{-1}(z,x) \langle \phi(x)^\dagger \tilde{\phi}(z) \rangle \\ &= \sum_{y,z} M^{-1}(z,x) F(z,t|y,t) \langle \phi(x)^\dagger \phi(y) \rangle \\ &\to \sum_z M^{-1}(z,x) F(z,t|x,t) \ . \end{aligned} \tag{3.4.12}$$

Der geschmierte Fermionloop setzt sich also als gewichtete Summe der Propagatoren von z nach x zusammen. Die Gewichtung $F(z,t|x,t)$ stellt jedoch wiederum die Eichinvarianz des Ausdrucks her, da sie z und x durch Eichlinks eichinvariant verbindet. Die Verwendung geschmierter Volume-Sources führt im Prinzip natürlich auf die gleichen Beiträge. Hier verschwinden jedoch nur im Mittel über die Konfigurationen die nicht eichinvarianten Summanden.
Anzumerken ist, daß die iterativ erzeugte Smearing-Matrix ein Produkt der elementaren Smearing-Matrizen $F = F_0^{N_{sm}}$ ist. Bei der Bildung der Spur im Orts- und Farbraum, ergibt sich dann für unsere Wahl des Smearing-Parameters $N_{sm} = 50$

$$\sum_{x,z} M^{-1}(z,x) F_0^{50}(z,t|x,t) = \sum_{x,y,z} F_0^{25}(x,t|y,t) M^{-1}(z,y) F_0^{25}(z,t|x,t) \ , \tag{3.4.13}$$

also die Äquivalenz mit smeared-smeared Operatoren.

3.4.4 Volume-Source und SET auf dynamischen Konfigurationen

In diesem Abschnitt werden die Signalqualitäten der mit Volume-Source und SET gemessenen disconnected Korrelatoren verglichen. Neben den eigentlichen Korrelatoren werden effektive Massen betrachtet. Anschließend wird der SET-Meßfehler bei verschiedenen N_{est} betrachtet und so eine Unterscheidung zwischen Schätzfehler und durch endliche Konfigurationsanzahl bedingtes Rauschen ermöglicht.

Vergleich der Methoden

Abb. 3.3 zeigt einen Vergleich von auf verschiedene Weise auf einem SESAM-Gitter ($\kappa = 0.157$, 195 Konfigurationen) gemessenen disconnected Korrelatoren.
In der oberen Abbildung werden lokale Volume-Source ('V-ll') und SET ($N_{est} = 400$, 'S-ll') Signale präsentiert. Zur besseren Übersichtlichkeit wurden die Werte leicht auf der Zeitschichtachse gegeneinander verschoben. Als Referenz ist ebenfalls der

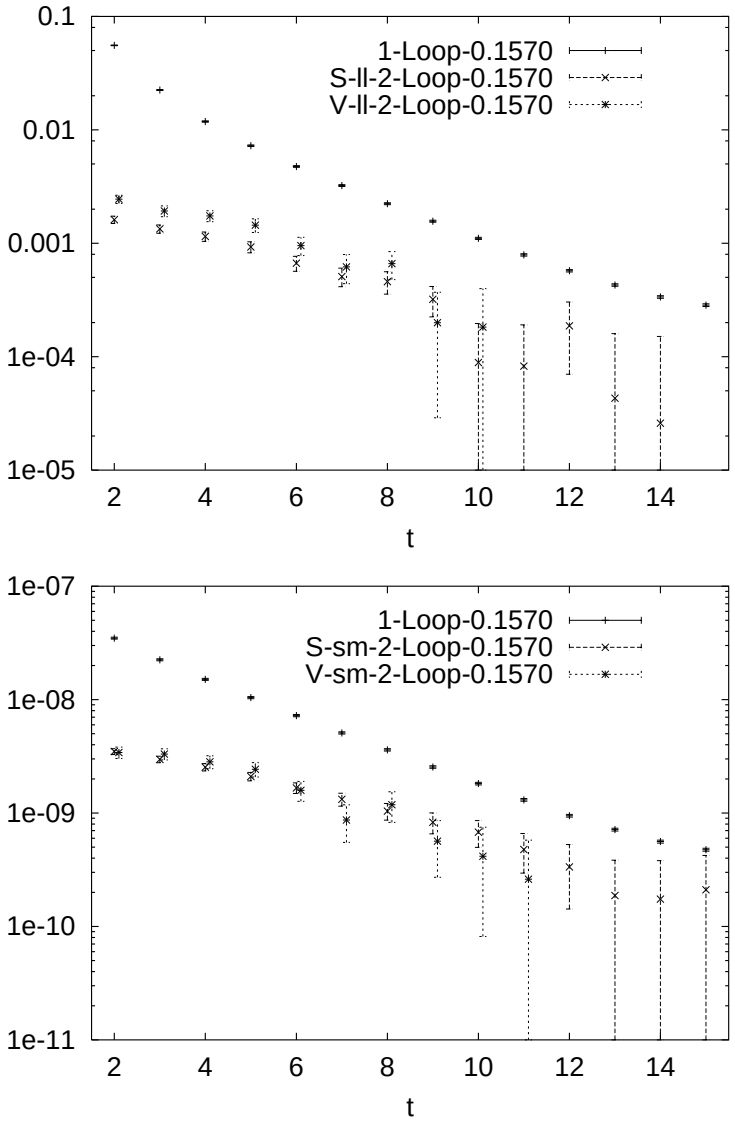

Abbildung 3.3: Disconnected Signale ($\kappa = 0.157$), lokal (oben) und geschmiert

Standard-Connected-Korrelator ('1-Loop') angegeben. Gleiches ist in der unteren Abbildung für die entsprechend geschmierten Opertoren ('V-sm' und 'S-sm') zu sehen.
Die lokalen Signale der Volume-Source Technik liegen für kleine Zeitschichten deutlich über den SET-Werten. Dies könnte als Hinweis auf einen systematischen Effekt gelten. Bei geschmierten Operatoren zeigt sich eine deutliche Reduktion dieses Effektes: Volume-Source- und SET-Signale stimmen innerhalb der Fehler überein. Offensichtlich ist in beiden Fällen der deutlich geringere Meßfehler der SET-Methode. Diese Methode liefert auch für große Zeitschichten signifikante Signale. Besser ist die Signalqualität an effektiven Massen $m_{\eta',eff}$ zu beurteilen. Diese werden aus dem

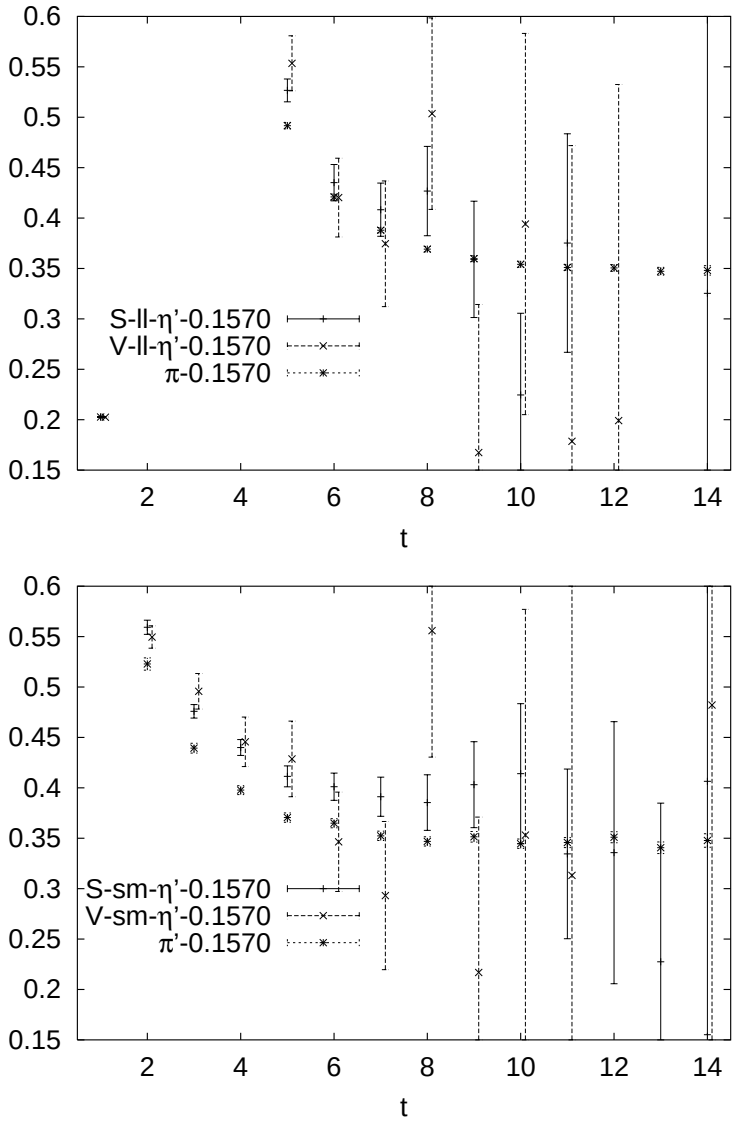

Abbildung 3.4: Eff. Massen ($\kappa = 0.157$), lokal (oben) und geschmiert

Propagator durch iterative Lösung von

$$\frac{G(t+1)}{G(t)} = \frac{exp(-m_{\eta',eff}(t+1)) + exp(-m_{\eta',eff}(T-t-1))}{exp(-m_{\eta',eff}t) + exp(-m_{\eta',eff}(T-t))} \tag{3.4.14}$$

bestimmt und geben Aufschluß über die Projektion auf den Grundzustand. In Abb. 3.4 werden auf ähnliche Weise effektive Massen von π, Volume-Source-η' ('V-ll/sm') und SET-η' ('S-ll/sm') gezeigt. Deutlich sind in der unteren Abbildung für geschmierte Operatoren Ansätze von Massenplateaus des SET-η' ab $t \approx 5$ erkennbar. Dies ist ein starkes Anzeichen dafür, daß eine gute Projektion auf den η'-Grundzustand vorliegt. Das η' ist somit im Gegensatz zu früheren Analysen der Standardspektrumsmethodik der Massenextraktion durch Fits an Propagatoren im Bereich von Plateaus effektiver Massen zugänglich! Für lokale Quellen lassen sich

Plateaus des SET-η' hingegen nicht klar erkennen. Die Volume-Source-Methode liefert hier für beide Quelltypen deutlich größere Fehler und mithin keine verläßlichen Signale.
Als Ergebnis dieser Betrachtungen wurde in der Analyse des vollen SESAM/TχL-Samples deshalb ausschließlich die Stochastic-Estimator-Technik mit $O(400)$ Quellvektoren zur Schätzung der in die Massenbestimmung eingehenden disconnected Korrelatoren verwandt.

Statistischer Fehler und Anzahl stochastischer Quellen

Der Meßfehler des disconnected Signals ist durch 2 Ursachen bedingt. Die endliche Größe des Konfigurationsensembles und die Anzahl der stochastischen Quellvektoren. In diesem Abschnitt wird versucht die Qualität von SET und Volume Sources anhand der Abhängigkeit von der Anzahl der Quellvektoren darzustellen. Bei fester Größe des Konfiguratonsensembles ist so eine Separation der Fehlerquellen möglich. Der Schätzfehler einer Messung von $Sp(\Gamma M^{-1})$ auf einer festen Anzahl N_{conf} von Konfigurationen sollte dann in Abhängigkeit von der Anzahl N_{est} der stochastischen Quellvektoren für genügend großes N_{est} durch

$$\sigma^2 = \frac{S^2_{est}}{N_{est}} + S^2_{conf} \tag{3.4.15}$$

gegeben sein. In diesem Sinne ist bei fester Größe des Vakuumensembles natürlich eine ausreichende Genauigkeit der Stochastischen Estimation erreicht, wenn der hierdurch bedingte Term S^2_{est}/N_{est} kleiner als der durch die Abweichungen unter den Konfigurationen bedingte Term S^2_{conf} wird. Eine Erhöhung von N_{est} führt dann zu keiner merklichen Meßfehlerminderung mehr. Zur Betrachtung der N_{est}-Abhängigkeit wurden auf dem $\kappa = 0.157$-Gitter mit geschmierten Operatoren im Mittel über 195 Konfigurationen Messungen für $N_{est} = 2^n$ ausgeführt. Diese Werte wurden dann mit der üblichen Statistik $N_{est} = 400$ und dem Volume-Source-Wert '$N_{est} \sim 12$' verglichen.
Die Spur von $\gamma_5 M^{-1}$ wird in Abb. 3.5 betrachtet. Oben sind die Meßwerte mit den jeweiligen Fehlern in Abhängigkeit von N_{est} aufgetragen. Unten werden die statistischen Fehler mit einem Fit an die asymptotische Form 3.4.15 dargestellt. Wegen der Korrelation mit der topologischen Ladung der einzelnen Konfigurationen dominiert hier offensichtlich der 'Eichrauschterm' im statistischen Fehler $S^2_{conf} = lim_{N_{est}\to\infty}(\sigma^2)$. Der statistische Fehler des Signals wird bereits für $N_{est} \geq 16$ recht gut durch 3.4.15 beschrieben. Der recht kleine Fehler der Volume-Source-Methode spiegelt deren höhere 'Pseudoeffizienz' nach [57] wieder, allein zur Bestimmung dieser Größe scheint die Stochastische Estimation nicht erforderlich.
Das für den η'-Propagator relevante 2-Loop-Signal wird in Abb. 3.6 beispielhaft für $t = 8$ betrachtet. Wiederum sind oben Signale und Fehler, in der unteren Abbildung lediglich das Verhalten der Fehler dargestellt. Der statistische Fehler wird hier erst für $N_{est} \geq 64$ gut durch die asymptotische Form 3.4.15 beschrieben. Beachtenswert ist der relativ zu $Sp(\gamma_5 M^{-1})$ wesentlich geringere Anteil des 'Eichrauschterms'. Die

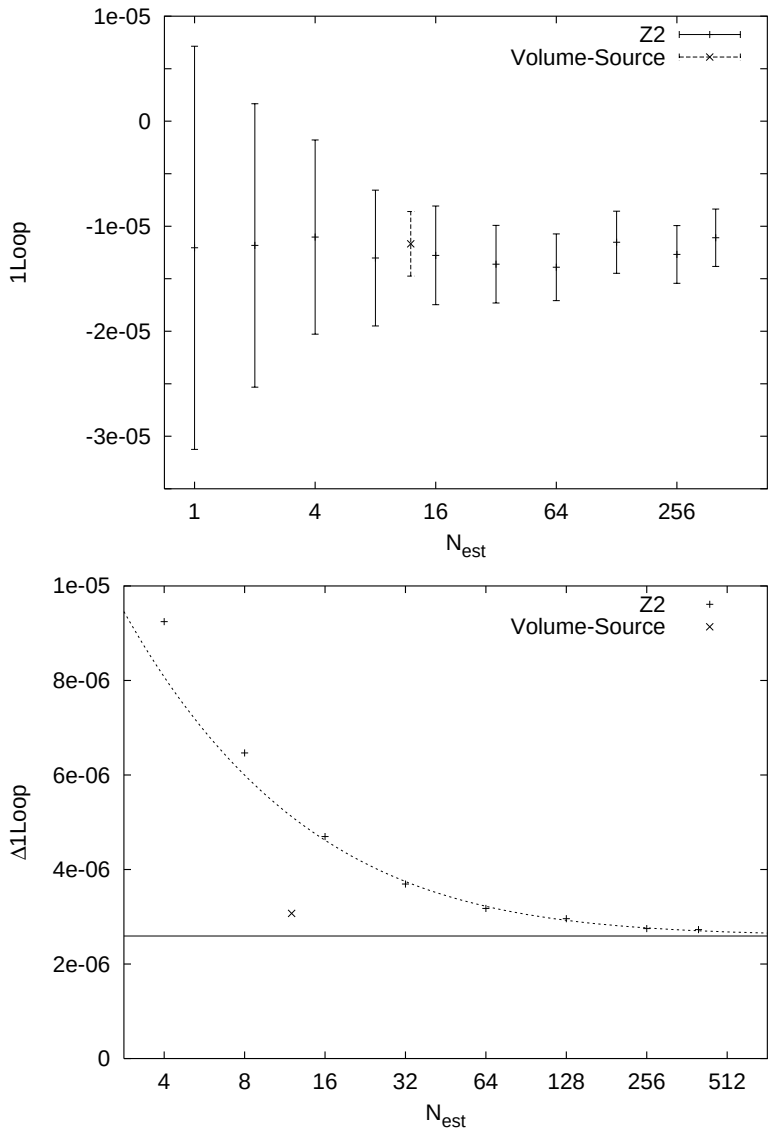

Abbildung 3.5: $Sp(\gamma_5 M^{-1})$ ($\kappa = 0.157$), Signal und Fehler

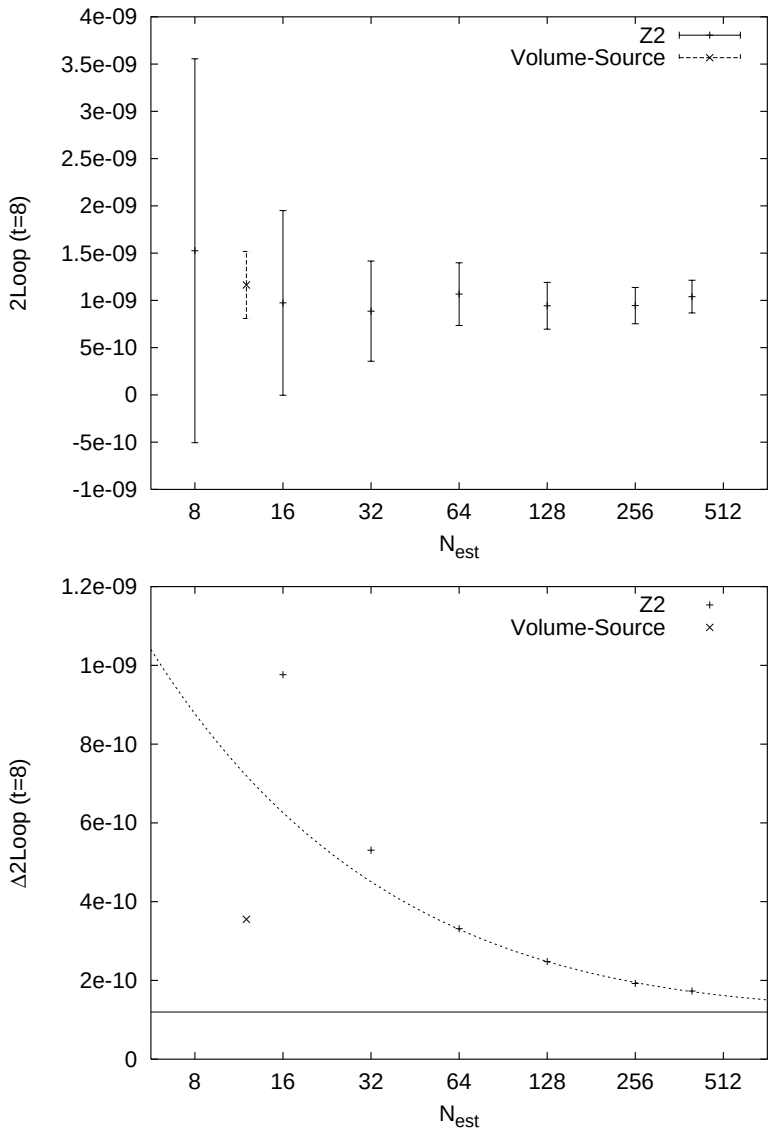

Abbildung 3.6: 2-Loop-Signale ($\kappa = 0.157$, $t = 8$), Signal und Fehler

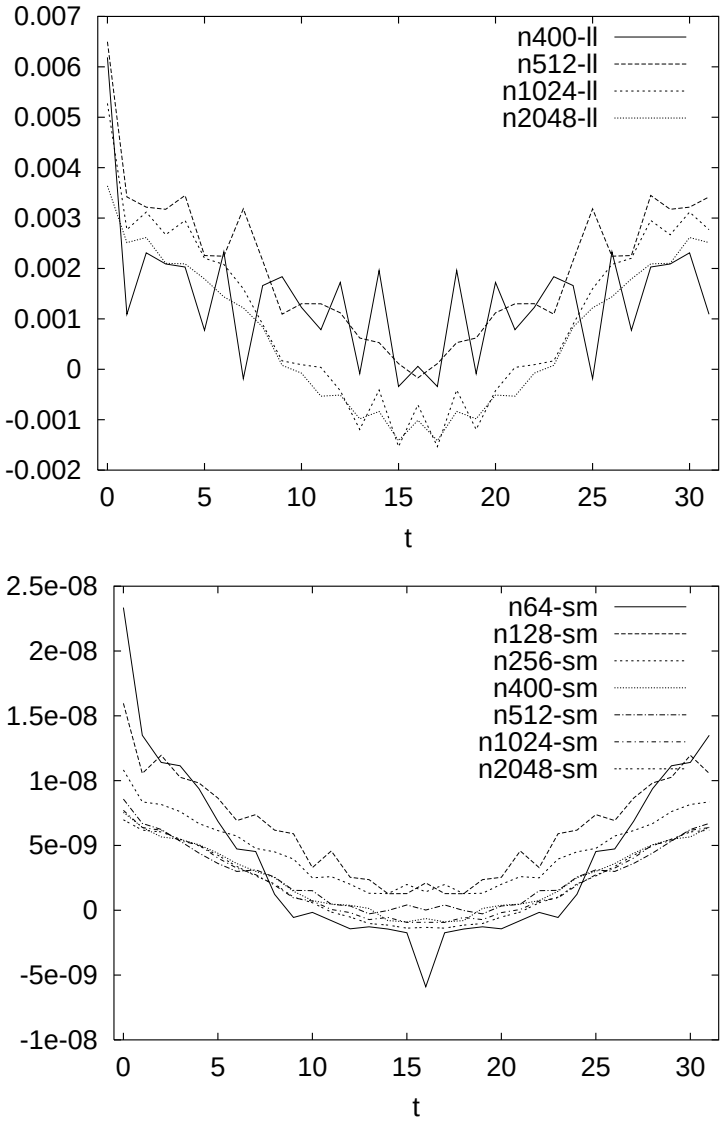

Abbildung 3.7: 2-Loop-Signal auf einer Konfiguration, lokal (oben) und geschmiert

Erhöhung der Anzahl der stochastischen Quellen bis $N_{est} = 400$ führt demnach für das 2-Loop-Signal auf signifikante Reduzierung des statistischen Fehlers. Insbesondere im Vergleich zur Volume-Source-Methode läßt sich mit $N_{est} = 400$ der statistischen Fehler halbieren. Der Fit der asymptotischen Form 3.4.15 an den statistischen Fehler zeigt jedoch, daß eine weitere Erhöhung von N_{est} zu keiner entscheidenden weiteren Rauschreduktion führte.

Abb. 3.7 zeigt zur Illustration das 2-Loop-Signal für alle Zeitschichten auf einer einzelnen Konfiguration bis zu einem Wert von $N_{est} = 2048$. Nach Abb. 3.7 oben scheint bei der Verwendung lokaler Quellen eine 'Konvergenz' des Signals erst bei einer sehr hohen Anzahl von $O(2000)$ stochastischer Quellvektoren erreichbar zu sein. Nichtgeschlossene Loops werden auf einzelnen Konfigurationen mit kleiner Anzahl von Quellvektoren anscheinend unzureichend unterdrückt. Eine in diesem Sinne aus-

reichende Statitstik konnte im Rahmen unserer Rechnerkapazität bei weitem nicht auf dem vollen Konfigurationsensemble durchgeführt werden. Gemäß Abb. 3.7 unten läßt sich bei Verwendung geschmierter, stochastischer Quellen eine 'Saturation' des 2-Loop-Signals hingegen auch auf einer einzelnen Konfiguration bereits mit der in der vollen Analyse verwendeten Statistik $N_{est} = 400$ erreichen.
Eine Erhöhung der Anzahl der betrachteten Konfigurationen könnte im Prinzip eine Stabilisierung des Signals bewirken. Analog zum Vorgehen in [20], wo Volume-Source-Messungen auf jeder Trajektorie ausgeführt werden [5], würden dann zusätzliche SESAM- bzw. TχL-Trajektorien ausgewertet. Problematisch sind hier jedoch die langen Autokorrelationszeiten der topologischen Ladungen. Messungen auf in diesem Sinne korrelierten Konfigurationen könnten möglicherweise, vorausgesetzt topologische Effekte bedingten die η'-Masse, die Größe der Jackknife-Fehler nicht deutlich reduzieren. In unserer Analyse beschränkten wir uns deshalb auf die Verwendung geschmierter Operatoren zur effektiven Rauschunterdrückung auf Konfigurationen im Abstand von ca. 25 Trajektorien.

3.4.5 Volume-Source und SET auf quenched Konfigurationen

Die disconnected Signale für geschmierte Operatoren mit Volume-Source ('QV') im Vergleich zu SET ($N_{est} = 400$, 'QS') auf quenched Konfigurationen bei $\kappa_v = 0.155$ in Abb. 3.8 oben zeigen das deutlich stärkere Rauschen der Volume-Source-Methode. Auf kleinen Zeitschichten liegt das Volume-Source-Signal über dem SET-Signal. Im relevanten Bereich stimmen sie jedoch im Rahmen der Fehler überein.
In der quenched Analyse ist $R(t)$ primäre Observable. Abb. 3.8 unten zeigt diese Verhältnisse für geschmierte Operatoren mit Volume-Source und SET auf quenched Konfigurationen mit $\kappa_v = 0.1545, N_{est} = 400$ und $\kappa_v = 0.156, N_{est} = 200$. Anzumerken ist hier, daß das erwartete lineare Verhalten mit deutlich größeren Fehlern für moderate $t \leq 10$ auch bei Anwendung der Volume-Source-Methode erkennbar ist.

3.4.6 Rahmendaten der Analysen

Zur numerischen Inversion der Wilsonmatrix wurden sowohl even-odd-präkonditionierte Minimal-Residual-Inverter als auch SSOR-präkonditionierte BiCG-Stab-Inverter verwendet. Die benötigte hohe Anzahl an stochastischen Quellvektoren machte die Durchführung der Inversionen zur Quarkloop-Berechnung auf den massiv parallelen APE100-Rechnern in Bielefeld und Zeuthen erforderlich.
In Tab. 3.1 sind die jeweiligen Rahmendaten der stochastischen Messungen angegeben. Auf den $24^3 \times 40$-TXL-Gittern beschränkten wir uns aus Rechenzeitgründen auf 100 stochastische Inversionen, lediglich auf dem $\kappa = 0.1575$-Gitter wurde mit

[5] Dieses Programm entspricht auf unseren Konfigurationen der Messung mit $25 * 12 = 300$ Volume-Source-Quellen im Vergleich zu $N_{est} = 400$ stochastischer Quellvektoren pro 25 Trajektorien

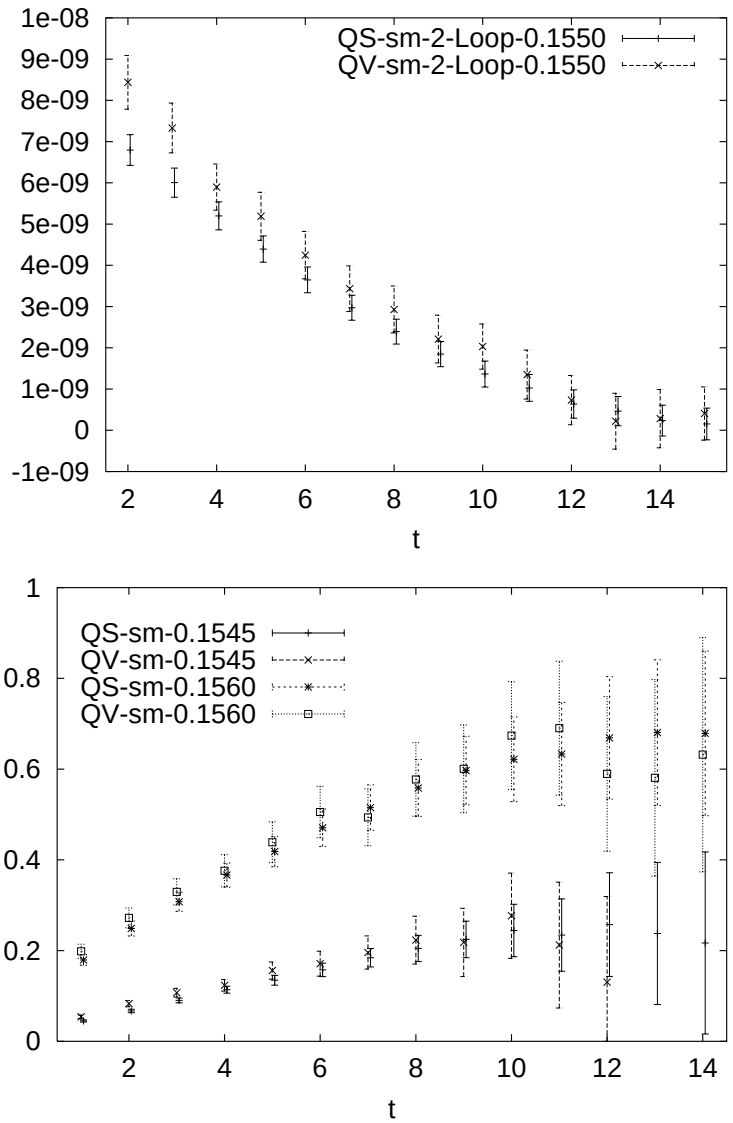

Abbildung 3.8: Quenched disconnected Korrelatoren $\kappa_v = 0.155$ (oben) und Verhältnisse

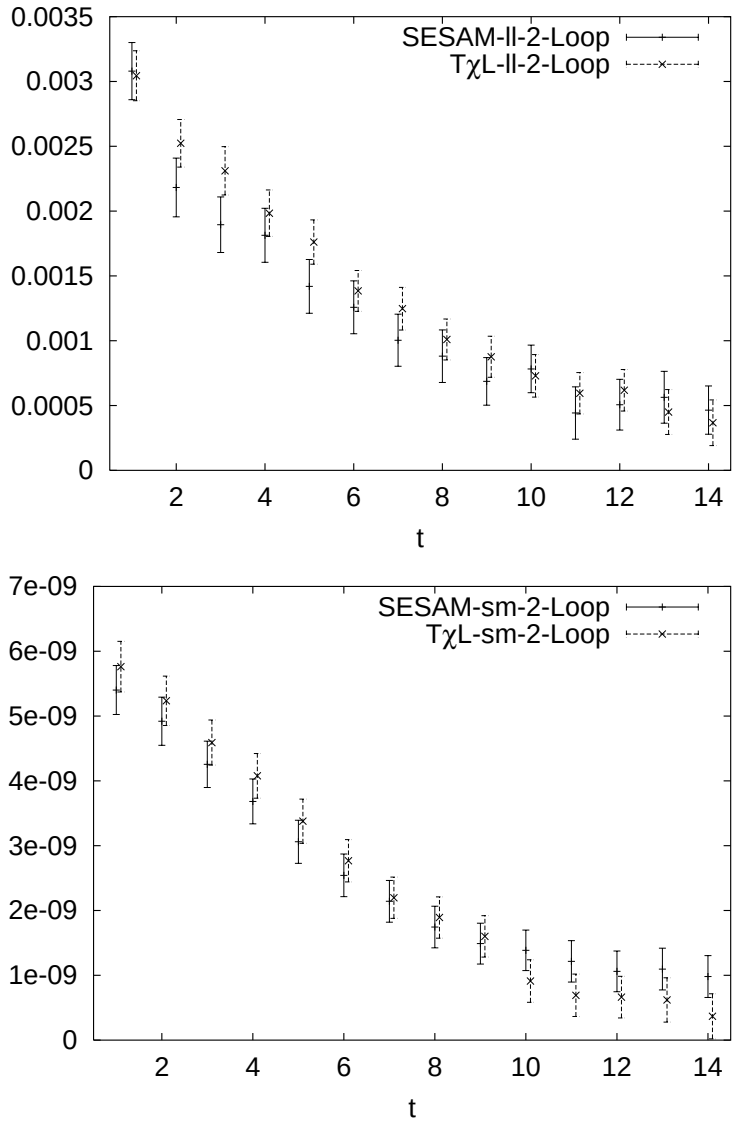

Abbildung 3.9: SESAM- und TχL-2-Loop-Signale bei $\kappa = 0.1575$, lokal (oben) und geschmiert

Tabelle 3.1: Parameter der Analyse

κ	m_π/m_ρ	$L^3 * T$	$N_{est} - ll$	$N_{est} - sm$	N_{conf}
$nf = 2$	$\beta = 5.6$				
0.1560	0.834(3)	$16^3 * 32$	400	400	195
0.1565	0.813(9)	$16^3 * 32$	400	400	195
0.1570	0.763(6)	$16^3 * 32$	400	400	195
0.1575	0.692(10)	$16^3 * 32$	400	400	195
0.1575	0.704(5)	$24^3 * 40$	400	100	156
0.1580	0.574(13)	$24^3 * 40$	100	100	156
$n_f = 0$	$\beta = 6.0$				
0.1535	0.807(8)	$16^3 * 32$	-	400	200
0.1545	0.744(10)	$16^3 * 32$	-	400	200
0.1550	0.700(11)	$16^3 * 32$	-	400	200
0.1555	0.65(1)	$16^3 * 32$	-	200	200
0.1560	0.59	$16^3 * 32$	-	200	200

lokalen Quellen eine Referenzanalyse mit $N_{est} = 400$ gerechnet. Wegen des 'Self-Averagings' auf der berechneten Zeitschicht kann angenommen werden, daß für den 2-Loop-Korrelator die statistische Güte des Signals hauptsächlich durch das Produkt $L^3 * N_{est}$ bestimmt ist. Abb. 3.9 für den 'doppelten Meßwert' $\kappa = 0.1575$ bestätigt dies zumindest qualitativ. Während das TχL-Signal mit lokalen Quellen mit $N_{est} = 400$ deutlich kleinere Fehler als die SESAM-Messung zeigt, sind für geschmierte Operatoren die Fehler der $N_{est} = 100$-TχL- und $N_{est} = 400$-SESAM-Daten wie erwartet von vergleichbarer Größe. Dieses Self-Averaging ist ein Vorteil gegenüber Ergebnissen mit einem anderen Verfahren zur Rauschunterdrückung, der perturbativen Subtraktion, in [21], welche bei gegebenem N_{est} auf kleineren Gittern kleinere relative Fehler der Messungen erhielten.
Abb. 3.9 zeigt darüberhinaus keine Hinweise auf Finite-Size-Effekte. Disconnected Signale auf SESAM- und TχL-Gittern mit $\kappa = 0.1575$ weichen inerhalb der Fehler nicht voneinander ab.

3.5 Analyse der vollen QCD

In diesem Abschnitt wird die Extraktion der η'-Masse auf Konfigurationen der vollen $N_f = 2$-QCD dargestellt.
Nach einer einführenden Erläuterung der experimentell relevanten Vergleichswerte und derer im Rahmen des Witten-Veneziano möglichen Extrapolation in die $N_f = 2$-Welt, wird auf die Bestimmung der Masse aus mit obigen Methoden erhaltenen Propagatoren eingegangen. Anschließend werden verschiedene Extrapolationsmöglichkeiten der so erhaltenen Massen zur physikalischen Seequarkmasse ausgeführt.

3.5.1 Experimentelle 'Vergleichsgrößen'

Primär in unserer Analyse zu reproduzierender Wert ist natürlich die η'-Masse

$$M_{\eta'} = 958 MeV \ . \tag{3.5.1}$$

Zur Umrechnung der Massen in Gittereinheiten, fixieren wir den Gitterabstand über die ρ-Masse, was für SESAM-Gitter [15] auf $a^{-1}(\kappa_l) = 2.302(64) GeV$ führt. In Gittereinheiten ist die primäre Vergleichsgröße also [6]

$$m_{\eta'}(N_f = 3) = 0.416(11) \ , \tag{3.5.2}$$

Zum Vergleich mit unserer $N_f = 2$-Welt sind nun zusätzliche Annahmen zu treffen. Naheliegende Ansätze sind hier:

- 'Naiver Vergleich'. Hier werden die Gitter η'-Massen direkt bei einer gemittelten Seequarkmasse $m_q = \frac{1}{3}(2m_l + m_s)$ mit dem Experiment verglichen. Unsicherheitsfaktor ist vor allem die Diskrepanz zwischen der Strange-Quark-Masse aus Pseudoskalar- oder Vektorkanal. In Anlehnung an [15] kann der Mittelwert $\kappa_s = 0.15608$ verwendet werden. Dies führt auf $\kappa_q = 0.15766$ bzw. $m_l = 0.017$. Das Konzept einer 'gemittelten Seequarkmasse' scheint jedoch kaum mit dem physikalischen Bild eines relativ schweren Strange-Quarks in einem See leichter Quarks verträglich zu sein. Auf eine Auswertung in diesem Sinne wird deshalb im folgenden nicht eingegangen.

- 'Witten-Veneziano-Extrapolation'. Hier wird gemäß Gl. 3.1.23 M_0^2 auf $N_f = 2$ reskaliert. Die Übertragung in die $N_f = 2$-Welt liefert so:

$$\begin{aligned} M_0(N_f = 2) &= \sqrt{2/3} M_0(N_f = 3) \simeq 702 MeV \\ m_0(N_f = 2) &= 0.3050(83) \\ m_{\eta'}(N_f = 2) &= a\sqrt{M_0^2(N_f = 2) + M_\pi^2} = 0.3108(86) \\ M_{\eta'}(N_f = 2) &\simeq 716 MeV \end{aligned} \tag{3.5.3}$$

  Diese Extrapolation setzt die Gültigkeit des Witten-Veneziano-Ansatzes voraus. Wird dieses $am_{\eta'}(N_f = 2)$ auf dem Gitter nicht reproduziert, so ist der Umkehrschluß problematisch, da zusätzliche systematische Effekte durch $O(a)$-Korrekturen, die Wahl der geschmierten Operatoren, Finite-Size-Effekte u. ä. kaum quantifizierbar sind. Neben den experimentellen Werten von m_0 und $m_{\eta'}$ werden im folgenden auch diese $N_f = 2$-Werte als Referenzwerte angegeben.

3.5.2 Korrelationsfunktionen

Interessant bei der Signalqualitätsbeurteilung ist natürlich die relative Signalgröße, d. h. das Verhältnis $R(t)$. In Abb. 3.10 wird diese Größe beispielhaft auf den SESAM-Gittern für $\kappa = 0.1575$ dargestellt. Insgesamt kann festgestellt werden, daß für Zeiten

[6] Im folgenden beschreiben wir Massen in physikalischen Einheiten durch M_* und in Gittereinheiten durch m_*.

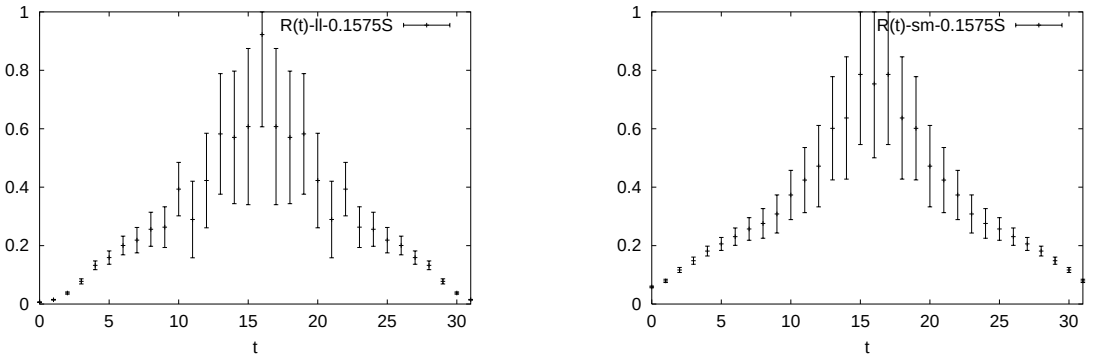

Abbildung 3.10: R(t), ll (links) und sm

bis $t < 12$ auch bei recht großen Quarkmassen bis $m_q \approx m_s$, signifikante disconnected Signale mit akzeptablen Fehlergrenzen vorhanden sind. Die Tatsache, daß im betrachteten Zeitschichtbereich die $R(t)$-Signale näherungsweise lineares Verhalten zeigen, deutet auf eine kleine Massendifferenz von π und η' auf unseren Gittern hin. Dies ergibt sich aus einer Entwicklung von 3.2.9.

3.5.3 Massen und Extrapolationen

Im folgenden werden η'-Massen mit Standardspektrumsmethoden extrahiert. Aus dem Propagator werden effektive Massen nach Gl. 3.4.14 bestimmt. Betrachtet man verschiedene Zeitschichten, so wird davon ausgegangen, daß ausreichende Projektion auf den Grundzustand vorliegt, wenn Plateaus in den effektiven Massen erkennbar sind. Im Bereich dieser Plateaus werden dann η'-Massen aus dem Fit des Propagators $G(t)$ (Gl. 3.2.8) extrahiert. Die jeweils 'optimalen' Fitbereiche werden anhand des Fit-$\chi^2/d.o.f.$ gewählt. Diese Massen werden zum Vergleich mit dem Experiment zur physikalischen leichten Seequarkmasse extrapoliert. Über den aus dem ρ gewonnenen Gitterabstand wird schließlich mit den physikalischen Werten verglichen.

Effektive Massen

Der connected Beitrag zum η'-Propagator ist für Wilsonfermionen proportional zum π-Propagator. Im Rahmen der chiralen Extrapolation sowie der Extraktion und Extrapolation der Kopplungsstärke m_0^2 werden aus diesem Anteil die Oktettmeson-Massen bestimmt.
Abb. 3.11 zeigt Plateaus in den effektiven Massen des π für Fitbereiche $9 \leq t \leq 16$. Diese so extrahierten Massen stimmen im Rahmen der Fehler mit den 'beidseitig geschmierten' SESAM-Spektrumsmessungen überein.
Die effektiven Massen aus den 'vollen' η'-Propagatoren (Abb. 3.12 (lokal), 3.13 (geschmiert)) zeigen zumindest Ansätze von Plateaus für relativ zu den Oktettfits kleine Zeiten, sodaß hier im Gegensatz zu den früheren Analysen die η'-Massen direkt aus Fits der Propagatoren entnommen werden können. Geschmierte Operatoren

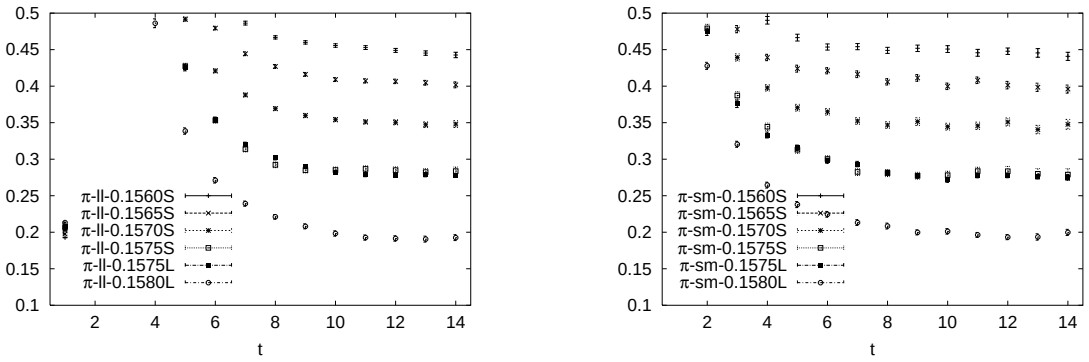

Abbildung 3.11: Effektive π-Massen (ll+sm)

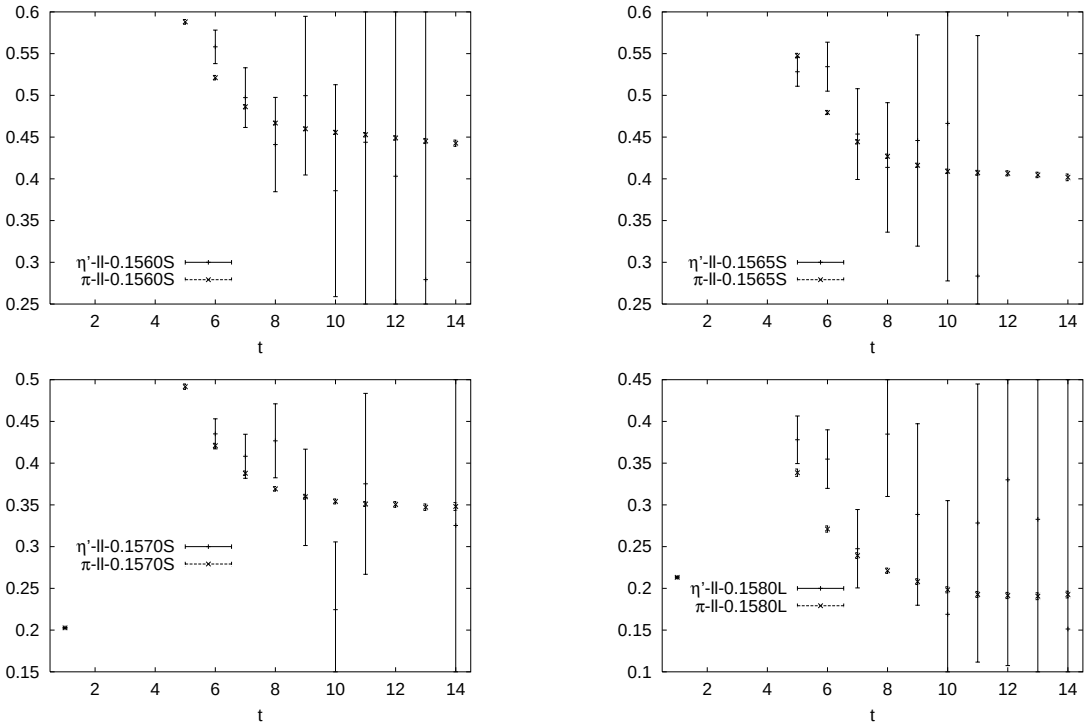

Abbildung 3.12: Effektive η'- und π-Massen (ll)

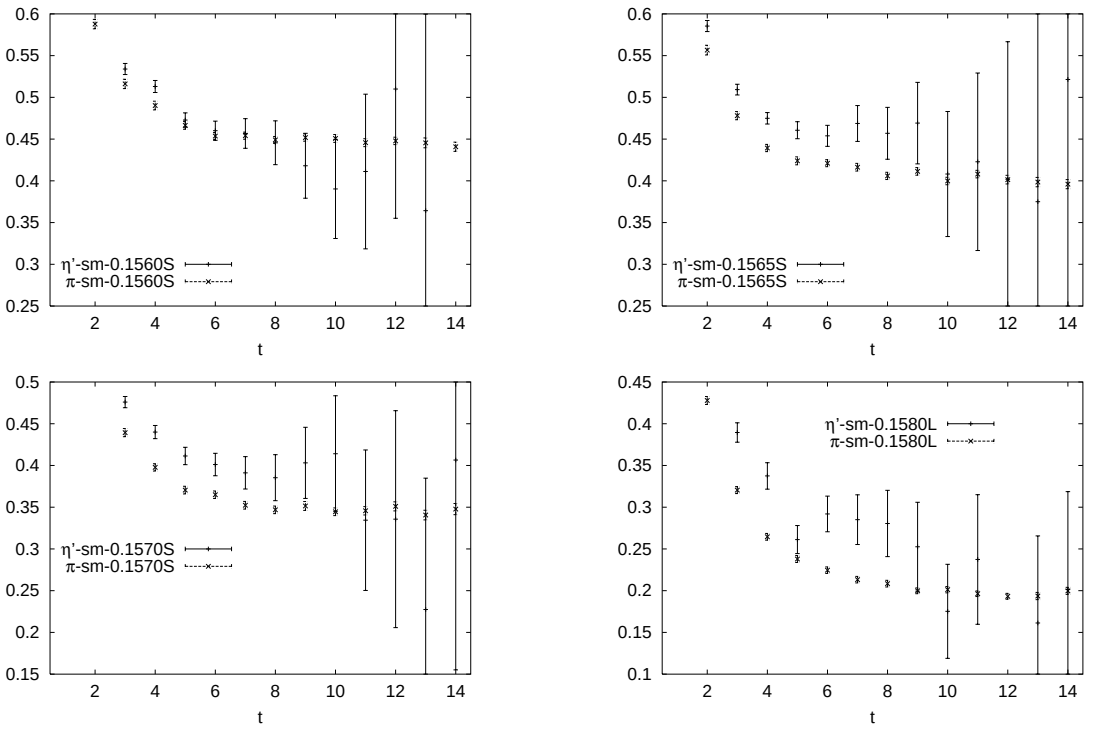

Abbildung 3.13: Effektive η'- und π-Massen (sm)

liefern hier relativ gute Plateaus und damit deutlich bessere Anzeichen von Grundzustandsprojektion. Der Vergleich mit π-Massenplateaus zeigt jedoch eine recht kleine Massendifferenz, was bereits aus den kleinen relativen Signalen von Abb. 3.10 ersichtlich war. Abb. 3.14 zeigt die effektive Massen bei $\kappa = 0.1575$ auf SESAM und TχL-Gittern. Im Rahmen unserer Genauigkeit können keine Anzeichen für Finite-Size-Effekte entnommen werden.

Fitbereiche der Massenbestimmung

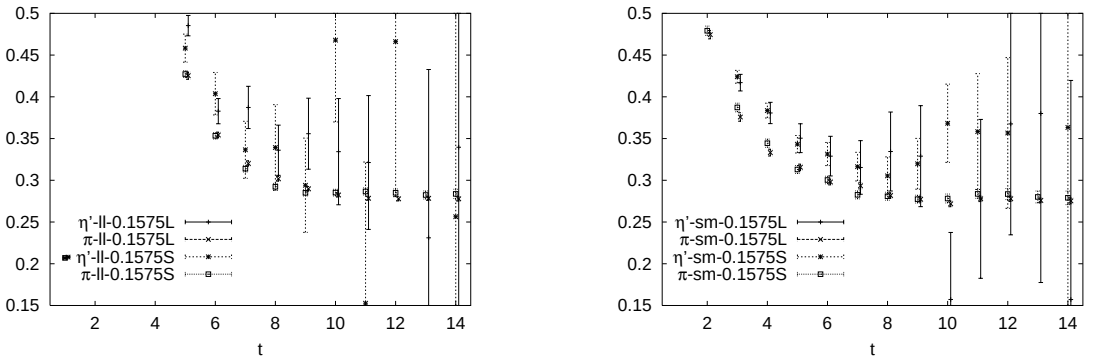

Abbildung 3.14: Effektive η'- und π-Massen (ll li., sm) $\kappa = 0.1575$

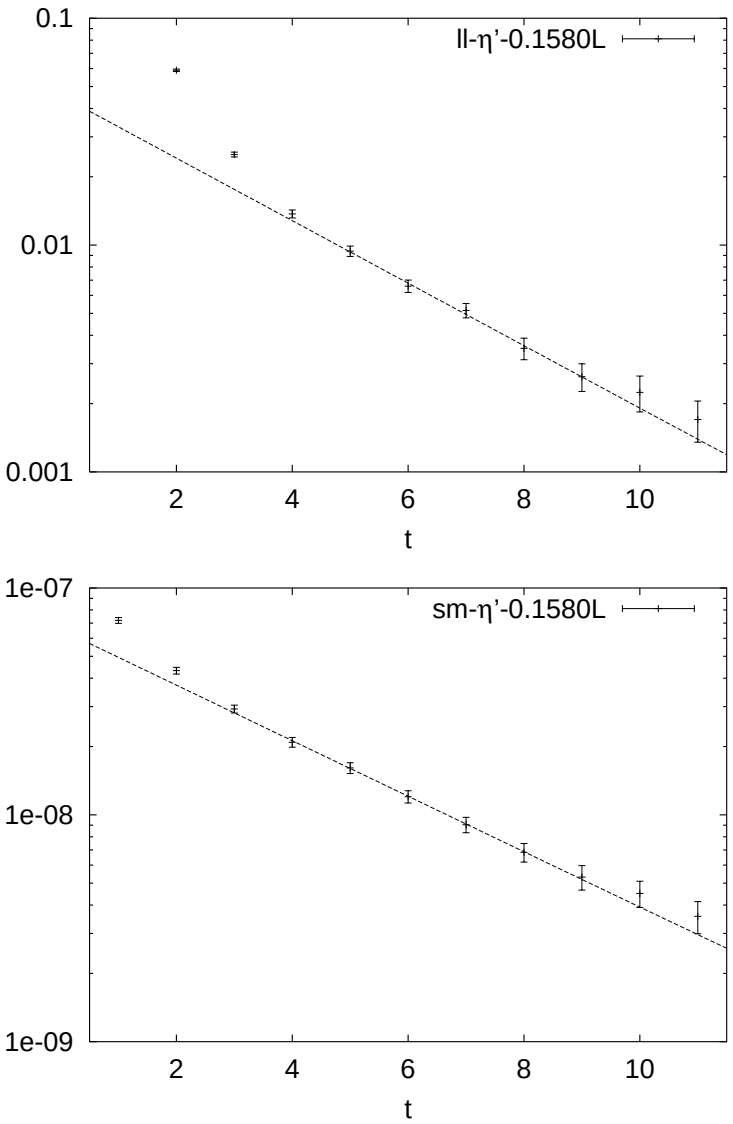

Abbildung 3.15: η'-Propagatoren ($\kappa = 0.158$), lokal (oben) und geschmiert

Tabelle 3.2: Fitbereiche

κ	$L^3 * T$	π-ll-Fit	η'-ll-Fit	π-sm-Fit	η'-sm-Fit
$nf = 2$	$\beta = 5.6$				
0.1560	$16^3 * 32$	$12 - 16$	$6 - 9$	$9 - 16$	$5 - 10$
0.1565	$16^3 * 32$	$13 - 16$	$6 - 9$	$9 - 16$	$5 - 10$
0.1570	$16^3 * 32$	$12 - 15$	$6 - 9$	$9 - 16$	$5 - 10$
0.1575	$16^3 * 32$	$12 - 15$	$6 - 9$	$9 - 16$	$6 - 11$
0.1575	$24^3 * 40$	$12 - 15$	$6 - 9$	$9 - 16$	$5 - 9$
0.1580	$24^3 * 40$	$12 - 15$	$6 - 9$	$9 - 16$	$5 - 9$

Massen wurden im Bereich der Plateaus der effektiven Massen der geschmierten Operatoren bestimmt. Anhand des jeweiligen $\chi^2/d.o.f.$ des Fits wurden 'optimale' Fitbereiche (siehe Tab. 3.2) ausgewählt. Fits der η'-Propagatoren von den angegebenen unteren Zeitschichten bis zur Gittermitte lieferten im allgemeinen konsistente Massen, wurden aber wegen der deutlich größeren Meßfehler in der Analyse nicht berücksichtigt. Die entsprechenden Fits an η'-Propagatoren $G(t)$ sind in Abb. 3.15 für die leichteste Quarkmasse $\kappa = 0.158$ jeweils mit lokalen und geschmierten Operatoren beispielhaft dargestellt. Es zeigt sich die deutlich verbesserte Grundzustandsprojektion der geschmierten Propagatoren für kleine Zeiten.

Chirale Extrapolationen

Ziel dieser Analyse ist, die hier gemessenen Größen mit experimentellen Werten im Bereich physikalischer leichter Seequarkmassen m_l zu vergleichen. Die erforderlichen Extrapolationen in der Quarkmasse werden durch die Übernahme von κ_c und $\kappa_l \to m_l = 1/2(1/\kappa_l - 1/\kappa_c)$ aus der SESAM-Analyse [15] des leichten Spektrums bestimmt. In diesem Rahmen wurden κ_c und κ_l aus den Extrapolationsbedingungen $m_\pi^2(\kappa_c) = 0$, sowie $m_\pi/m_\rho(\kappa_l) = 0.1785$ bestimmt. Die Massen wurden aus der Betrachtung von Operatoren mit geschmierten Quellen und Senken gewonnen. Hier wurde mit lokalen, bzw. mit lokal-geschmierten Operatoren und zusätzlich noch auf den größeren TXL-Gittern gemessen. Rechtfertigung für die Übernahme der SESAM-Parameter ist, daß die SESAM-Analyse auf Standardextrapolationen von Daten aus den π- und ρ-Kanälen, d.h. Daten mit sehr guter Statistik beruht und somit Grundlage für weitergehende Extrapolationen, also auch unsere η'-Analyse, sein muß. In Abb. 3.16 zeigt sich, anhand der Extrapolation lokaler und geschmierter π-Massenquadrate, die sehr gute Verträglichkeit der κ_c-Wahl mit unseren Daten.
Die Frage des Extrapolationsansatzes für die η'-Masse ist im Prinzip offen. Einerseits ist bei unseren relativ kleinen disconnected Signalen natürlich der π-Anteil der η'-Massen dominant, sodaß ein Fit der Massenquadrate analog zum Ansatz aus der chiralen Störungstheorie für die Oktettmesonen naheliegt. Dieser Fit wird in Abb. 3.17 gezeigt. Die Qualitäten der gezeigten Extrapolationen ergeben sich zu $\chi^2/d.o.f. = 1.1$ (lokal) und $\chi^2/d.o.f. = 4.2$ (geschmiert). Andererseits liegt ohne diese 'chiral-perturbativen Vorurteile' ein linearer Fitansatz in den η'-Massen (sie-

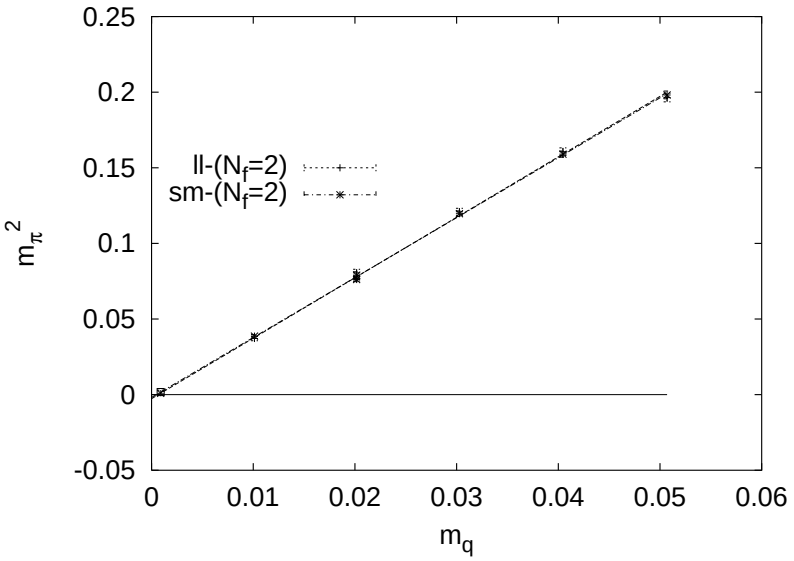

Abbildung 3.16: Chirale Extrapolation der π-Massenquadrate(ll+sm)

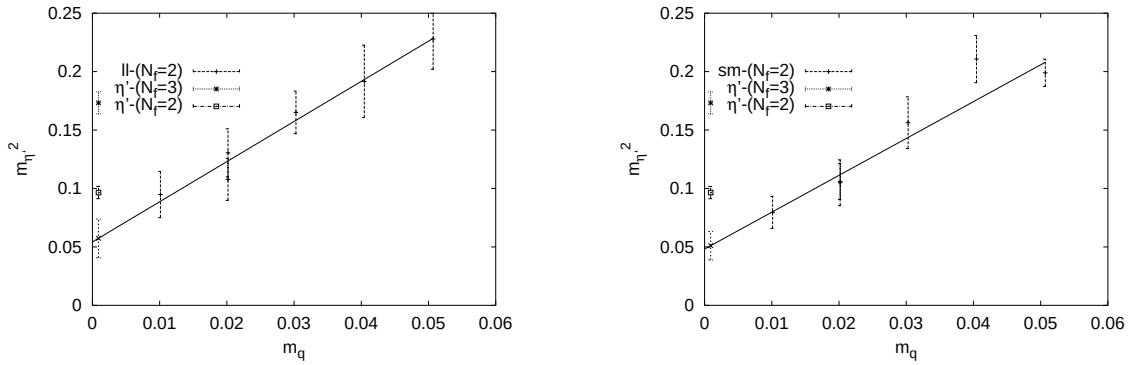

Abbildung 3.17: Chirale Extrapolation η'-Massenquadrate, lokal (links) und geschmiert

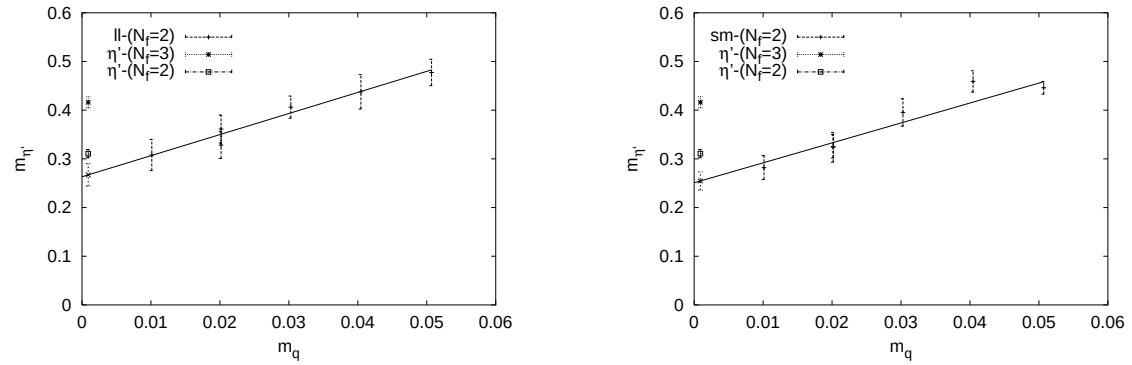

Abbildung 3.18: Chirale Extrapolation η'-Massen, lokal (links) und geschmiert

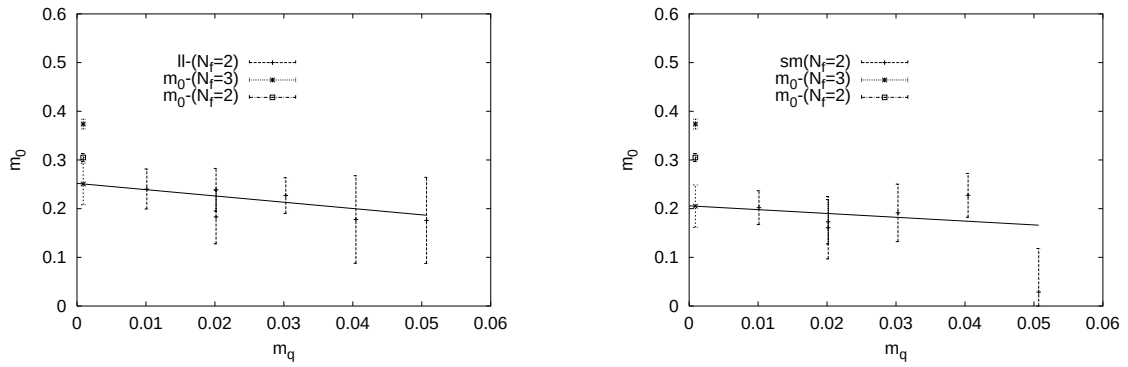

Abbildung 3.19: Chirale Extrapolation m_0, lokal (links) und geschmiert

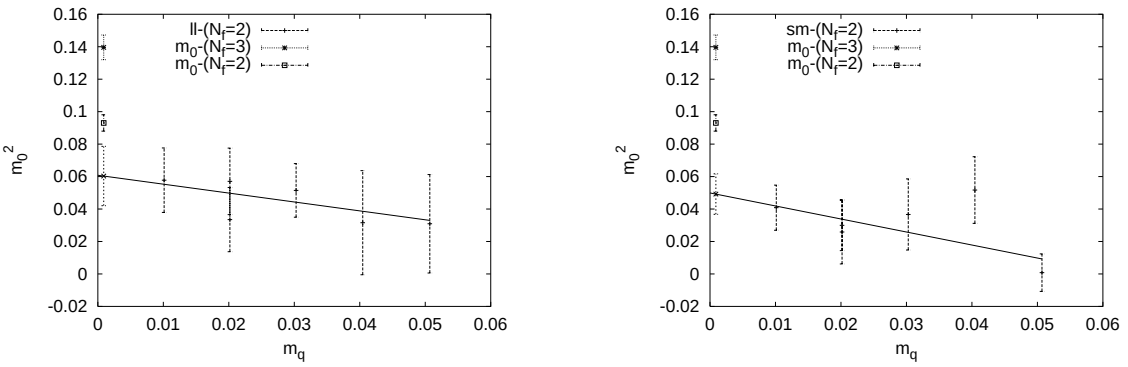

Abbildung 3.20: Chirale Extrapolation m_0^2, lokal (links) und geschmiert

he Abb. 3.18) nahe. Hier ergeben sich $\chi^2/d.o.f. = 1.1$ (lokal) und $\chi^2/d.o.f. = 5.6$ (geschmiert). Die relativ großen Fehler aus den Messungen mit lokalen Operatoren lassen offensichtlich beide Extrapolationsansätze zu. Die Messungen mit geschmierten Operatoren führen auf recht hohe $\chi^2/d.o.f$-Werte für beide Fitansätze. Eine eindeutige Auszeichnung eines Ansatzes ist kaum erkennbar. Fits mit quadratischer Quarkmassenabhängigkeit brachten keine wesentlichen Änderungen der Extrapolationen und Fitqualitäten.
Im Witten-Veneziano-Bild kann auch lediglich der reine Anomaliebeitrag m_0 zur η'-Masse betrachtet werden. In der $N_f = 2$-Welt ist dies $m_0^2 = m_{\eta'}^2 - m_\pi^2$. Die Frage der Quarkmassenabhängigkeit ist hierbei ebenfalls prinzipiell offen. In der 'quenched' Literatur werden sowohl Fits für m_0 [18], als auch m_0^2 [19] verwendet. In Anlehnung hieran zeigt Abb. 3.19 lineare Fits an m_0 und Abb. 3.20 lineare Fits an m_0^2 für lokale und geschmierte Messungen. Es zeigen sich mit verschwindender Quarkmassenabhängigkeit verträgliche Extrapolationen. Dies steht im klaren Gegensatz zu Analysen in der Valenzquark-Näherung [18], [19], welche einen deutlichen Anstieg von m_0 bzw. m_0^2 bei kleinen Quarkmassen beobachten. Die durch obige Extrapolationen erhaltenen 'physikalischen' m_0- und $m_{\eta'}$-Werte in Gitter- und physikalischen Einheiten sind zusammenfassend in Tab. 3.4 aufgeführt.
Zusammenfassend läßt sich hier feststellen, daß geschmierte Operatoren auf bessere Signale mit Massenplateauansätzen führen. Die hieraus extrapolierten η'- bzw. m_0-

Größen führen erwartungsgemäß auf kleinere Werte als die der lokalen Operatoren sind jedoch innerhalb der Fehler mit diesen verträglich. Die Extrapolationen liegen um ca. $15 - 25$ Prozent unter den 'pseudoexperimentellen' $N_f = 2$-Werten. Besonders deutlich zeigt sich dieses in den linearen Extrapolationen der Massenquadrate. Lokale Operatoren zeigen rauschigere Signale, fehlende η'-Massenplateaus aber im Rahmen unserer 'naiven' χ^2-orientierten Fits größere η'- bzw. m_0-Massen. Wegen der großen Fehler auf den einzelnen Meßwerten ist jedoch keiner der Extrapolationsansätze ausgezeichnet.

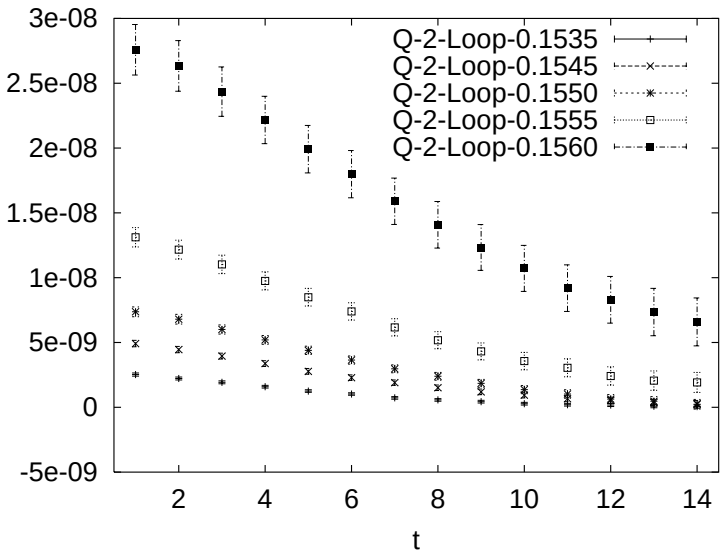

Abbildung 3.21: Geschmierte 2-Loop-Korrelatoren in der quenched Näherung

3.6 Ergebnisse der reinen Eichtheorie

Zum Test auf Unquenching-Effekte wurde eine Referenzstudie auf quenched Konfigurationen mit der Kopplung $\beta = 6.0$ durchgeführt. Zur Quarkloopmessung wurden ausschließlich geschmierte, stochastische Quellvektoren verwendet (vgl. Tab. 3.1). Das quenched Ensemble liefert einen mit den Konfigurationen der vollen QCD vergleichbaren physikalischen Gitterabstand von $a^{-1} = 2.26(6)$.

3.6.1 Korrelationsfunktionen und Massen

In Abb. 3.21 sind 2-Loop-Korrelatoren auf quenched Konfigurationen für die Quarkmassen $\kappa = 0.1535, 0.1545, 0.155, 0.1555, 0.156$ dargestellt.
In der Valenzquark-Näherung verschwindet nach dem Witten-Veneziano-Modell wegen $N_f = 0$ der Unterschied der direkt aus dem Propagator bestimmten η'-Masse zur π-Masse. Wegen nicht berücksichtigter Seequarkloops ist ja gerade nicht der volle η'-Propagator gegeben. Dies wird in Abb. 3.22 deutlich. Hier sind effektive Massen von π und η' für $\kappa = 0.155$ und geschmierte Operatoren dargestellt. Der 'η'-Propagator' für $N_f = 1$ wurde hier nach Gl. 3.2.6 bestimmt. Im Gegensatz zur Betrachtung von effektiven Massen auf dynamischen Konfigurationen ist hier keine Projektion auf einen Grundzustand mit einer größeren Masse als der des π aus den effektiven Massen zu entnehmen.
Geeignete Observable sind hier, nach Gl. 3.2.11, die Verhältnisse der disconnected und connected Amplituden, welche der Abb. 3.23 zu entnehmen sind. Die Verhältnisse zeigen innerhalb der Fehler für Zeitschichten $t < 11$ das erwartete lineare Verhalten. Abb. 3.24 zeigt beispielhaft einen Fit an $R(t)$ für die leichteste der hier betrachteten Quarkmasse $\kappa = 0.1560$. Interessant ist das bereits für sehr kleine t

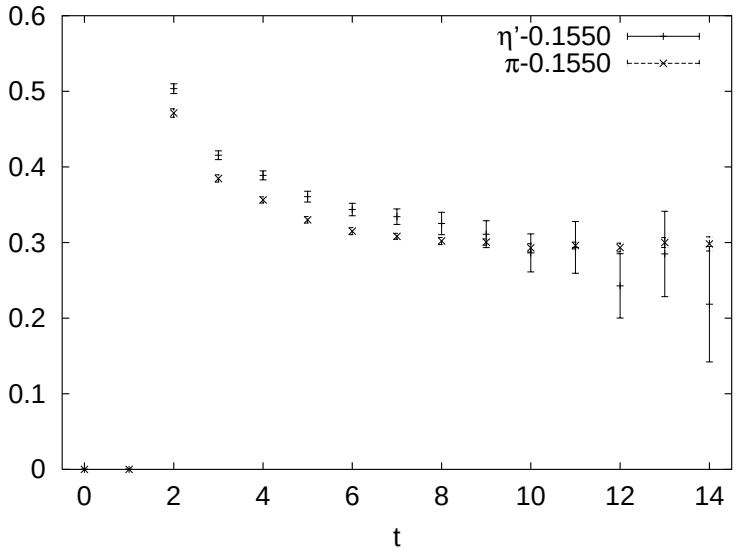

Abbildung 3.22: Effektive Massen, $\kappa = 0.155$ (quenched)

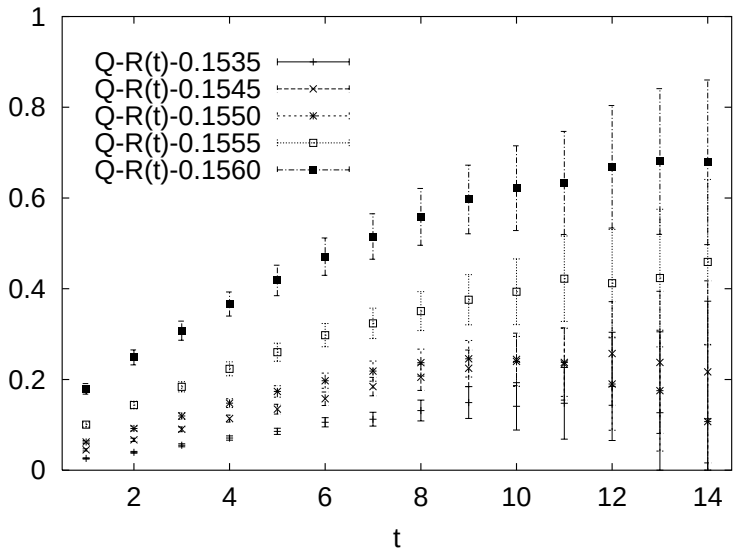

Abbildung 3.23: $R(t)$ in der quenched Näherung

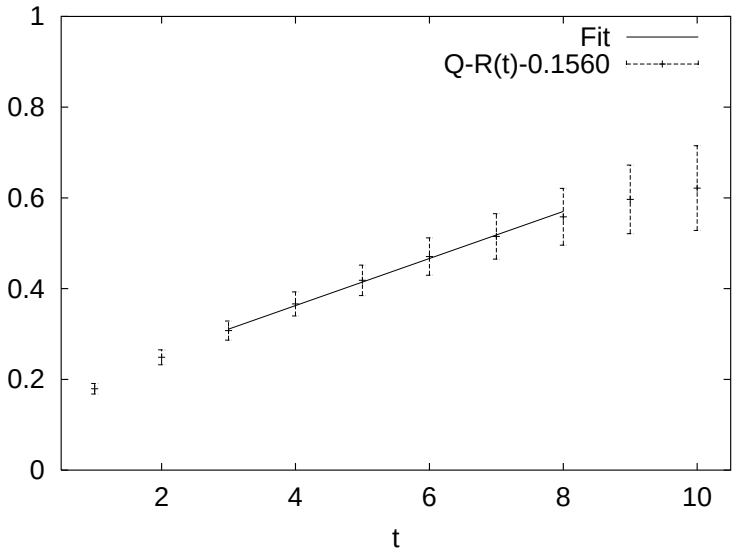

Abbildung 3.24: Quenched $R(t)$, $\kappa = 0.1560$

einsetzende asymptotische Verhalten.
Zur m_0^2-Berechnung aus der Steigung $m_0^2/2m_\pi$ der obigen Verhältnisse 3.2.11 wird die jeweilige π-Masse benötigt. In Abb. 3.25 sind auf unseren Gittern für diese Größe Plateaus der effektiven Massen für alle Valenzquarkmassen erkennbar. Anhand des jeweiligen $\chi^2/d.o.f.$ werden 'optimale' Fitbereiche für die m_π- und $m_0^2/2m_\pi$-Extraktionen bestimmt. Für alle Valenzquarkmassen kann so die π-Masse aus einem Fit über die Zeitschichten $8-16$ und $m_0^2/2m_\pi$ aus einem Fit über $3 \leq t \leq 8$ bestimmt werden.

3.6.2 Chirale Extrapolationen in der quenched Näherung

Zur chiralen Extrapolation von m_0 und m_0^2 ist anzumerken, daß die Quarkmassen, d. h. die κ_c- und κ_l-Bestimmung, aus einer SESAM-analogen Analyse des leichten quenched Spektrums bei $\beta = 6.0$ übernommen wurden. In Abb. 3.26 zeigt sich, anhand der Extrapolation lokal-geschmierter π-Massenquadrate, die sehr gute Verträglichkeit der κ_c-Wahl aus der Spektrumsanalyse mit beidseitig geschmierten Operatoren mit den verwendeten lokal-geschmierten Daten.
Im folgenden angegebene m_0- bzw. m_0^2-Daten sind bereits gemäß $m_0^2 \to N_f * m_0^2$ auf den Vergleich mit experimentellen '$N_f = 3$-Größen' skaliert. Die Frage des Ansatzes einer chiralen Extrapolation von m_0 ist wiederum offen. Abb. 3.27 zeigt lineare Extrapolationen von m_0- und m_0^2-Daten für Messungen mit geschmierten Operatoren. Diese Extrapolationen zeigen einen Anstieg mit abnehmender Quarkmasse. Dies Verhalten zeigten ebenfalls die Analysen [18] und [19]. Der dort beobachtete starke Anstieg im chiralen Limes kann hier bei Beschränkung auf die 3 leichtesten Quarkmassen reproduziert werden. Da die 'vollen' Extrapolationen auf $\chi^2/d.o.f. \simeq 1$ führen und Finite-Size-Effekte bei $\kappa = 0.156$ nicht ausgeschlossen werden können,

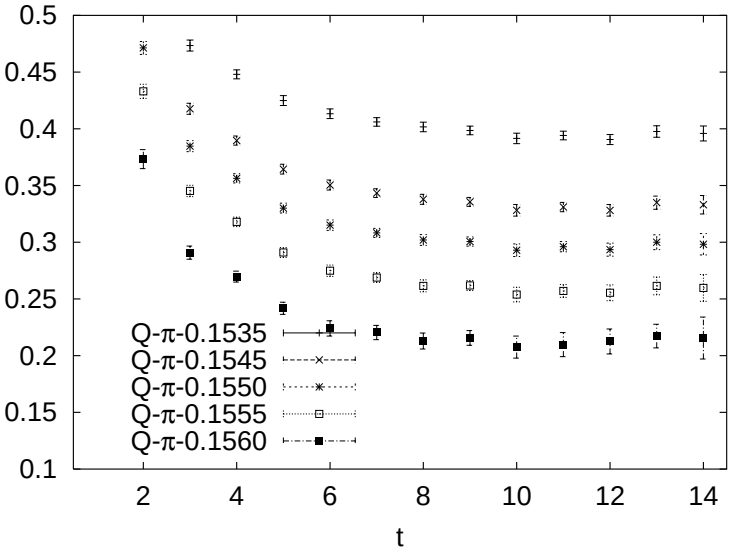

Abbildung 3.25: Effektive (quenched) π-Massen

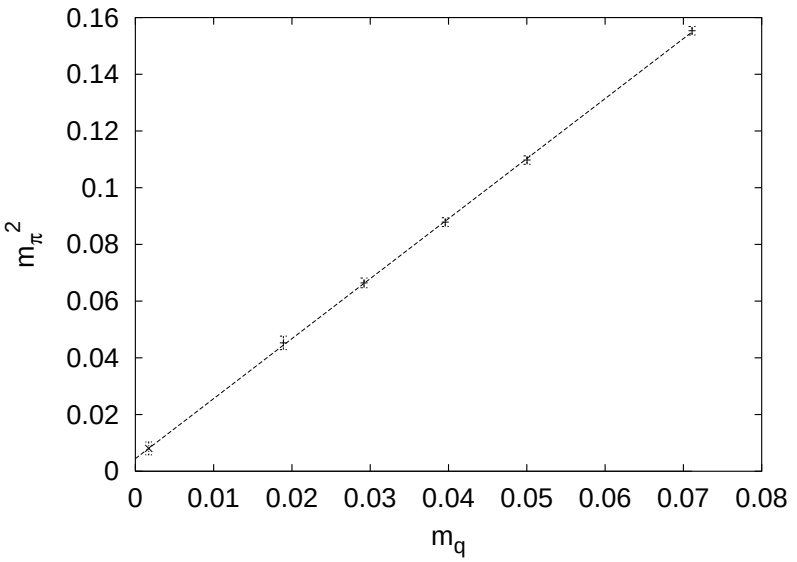

Abbildung 3.26: Chirale Extrapolation von m_π^2

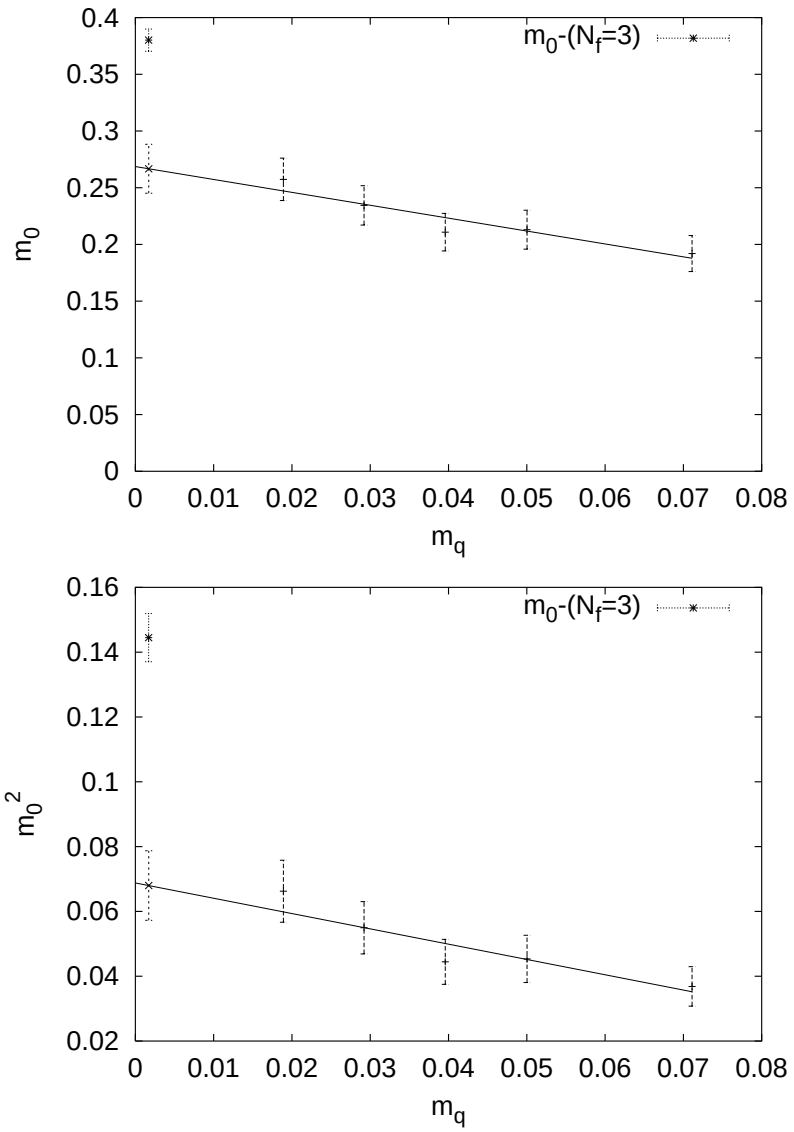

Abbildung 3.27: Chirale Extrapolation von m_0 (oben) und m_0^2

wird diese Beschränkung nicht weiter ausgeführt. Extrapolierte Werte von m_0 (siehe Tab. 3.4) liegen um ca. 30 Prozent unter den 'pseudoexperimentellen' Werten. Dieses Ergebnis ist den Resultaten der Analyse der vollen QCD mit geschmierten Operatoren qualitativ ähnlich.

3.7 Quark-Loops und topologische Ladung

Nach Gl. 3.1.10 gibt die topologische Ladung einer Feldkonfiguration die Differenz aus Instanton- und Antiinstantonzahl an. Standardmeßmethode der topologischen Ladung ist die Bestimmung als Integral über die gluonische Ladungsdichte 3.1.9

$$Q(x) = \frac{g^2}{32\pi^2} F^{a\mu\nu}(x)\tilde{F}_{a\mu\nu}(x) \tag{3.7.1}$$

auf 'gekühlten' Konfigurationen [7]. Kühlen [70] ist eine Glättung des Eichfeldes durch lokale Minimierung der gluonischen Wirkung. Praktisch geschieht dies durch iteratives Updaten der Eichlinks gemäß den klassischen Bewegungsgleichungen. Die langreichweitigen topologischen Anregungen können dann nach dieser Elimination der kurzreichweitigen Fluktuationen gemessen werden.
Eine derartige Referenzbestimmung der SESAM/TχL-Ensembles wurde in [42] ausgeführt. Die hier benutzte Minimierung mit der Plaquette-Wirkung führt jedoch mit steigender Iterationszahl zu wachsender Kühlungsskala, auch kleinere Instantonen werden geglättet. Um dies zu vermeiden, wurde Kühlung mit verbesserten und Fixpunkt-Wirkungen oder 'skalenkontrolliertes Kühlen' ([71] und dortige Referenzen) vorgeschlagen. Auf diese Ansätze konnte in diesem Rahmen jedoch nicht eingegangen werden.
Ein alternativer, fermionischer Zugang zur topologischen Ladung ergibt sich über die Anomaliegleichung 3.1.13 und das Indextheorem 3.1.18, welche die Spur von Quarkloops mit der topologischen Ladungsdichte verbinden. Nach 3.1.16 werden in diesem Abschnitt topologische Ladungen aus lokalen und geschmierten Quarkloops, sowie Korrelationen dieser Größen mit den Ladungen aus der gluonischen Methode bestimmt. Ziel ist also, die Ladung mit stochastischen Quarkloops auf ungekühlten, d.h. heißen Konfigurationen zu untersuchen. Insbesondere ist von Interesse, ob geschmierte Loops ähnlich wie gekühlte Konfigurationen auf eine Glättung kurzreichweitiger Fluktuationen und damit auf eine verbesserte Bestimmung führen. In Abb. 3.28 sind die topologische Ladungen der Konfigurationen auf einem Ausschnitt der SESAM-HMC-Trajektorien bei $\kappa = 0.1575$ zu sehen. Sie wurden mit der gluonischen Methode (gluon) und aus geschmierten (sm-Loop), sowie lokalen (ll-Loop) Quarkloops ermittelt. Da die Größe der involvierten Renormierungskonstanten in der vollen QCD nicht bekannt ist, wurden die Ladungen aus den (un-) geschmierten Quarkloops auf die gluonischen 'Referenzladungen' renormiert. Es zeigt sich analog zur Betrachtung von lediglich lokalen Quarkloops in [65] eine gute, qualitative Übereinstimmung der Methoden. Zur Renormierung wird in erster Näherung ein linearer

[7] Vergleich verschiedener Definitionen in [69].

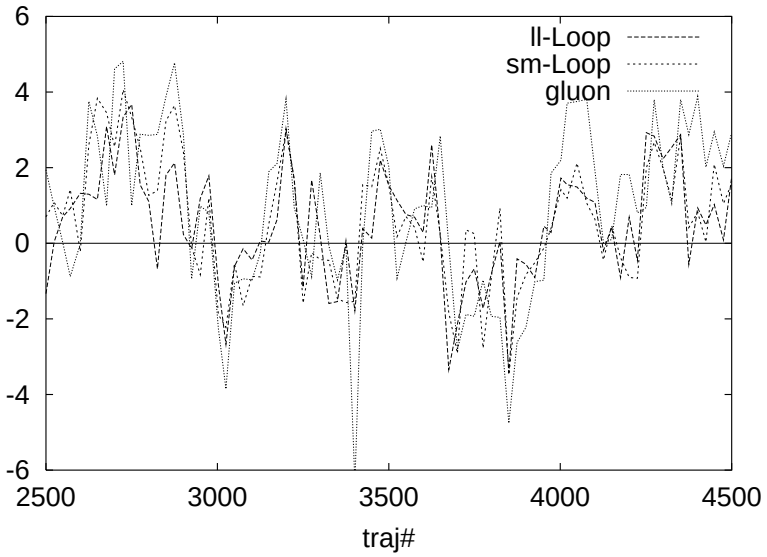

Abbildung 3.28: Topologische Ladung $\kappa = 0.1575$

Tabelle 3.3: Korrelationen der Meßmethoden

κ	Gitter	r_{gl-ll}	r_{gl-sm}	r_{ll-sm}
0.1560	SESAM	0.59	0.72	0.70
0.1565	SESAM	0.67	0.78	0.76
0.1575	SESAM	0.67	0.72	0.85
0.1575	TχL	0.78	0.75	0.89
0.1580	TχL	0.64	0.64	0.82

Zusammmenhang unterstellt und in Tab. 3.3 die Korrelationskoeffizienten

$$r(x,y) = \frac{< (x- < x >)(y- < y >) >}{\sqrt{(< (x- < x >)^2 >< (y- < y >)^2 >)}} \tag{3.7.2}$$

der zugehörigen linearen Regression angegeben. Zumindest für relativ große Quarkmassen erklären geschmierte Operatoren einen deutlich höheren Anteil der Varianz der topologischen Ladung nach der gluonischen Methode. Mit geschmierten Operatoren könnten so topologische Ladungen ohne Kühlen der Konfigurationen durch Stochastische Estimation von $Sp(\gamma_5 M^{-1})$ bestimmt werden. Zu vergleichen wären die topologischen Ladungen aus dem fermionischen Ansatz noch mit aus mit verbesserten Kühlverfahren gewonnenen gluonischen Werten, welche geringere systematische Fehler als die SESAM-Analyse aufweisen sollten.
Eine weitere Perspektive dieses fermionischen Ansatzes ist die Bestimmung der chiralen Suszeptibilität $\chi_L =< Q^2 > /(L^3 * T)$ (Gl. 3.1.12) auf dem Gitter. Smit und Vink [52] führten dieses Programm z.B. über die Berechnung einer interpolierten topologischen Ladung aus. Die benötigten Renormierungskonstanten κ_P können im Prinzip aus dem Fit der fermionischen Größen an die gluonischen Topologischen Ladungen bestimmt werden. Denkbar wäre in diesem Zusammenhang auch die Rechnung der

Renormierungskonstanten auf 'geheizten' Gittern bekannten Instantoninhalts. Auf diese Weise können auf $Q = 0$-Gittern mögliche additive Renormierungen von χ_L evaluiert werden. Interessant in diesem Zusammenhang ist in der vollen QCD insbesondere der Test auf die Seequarkmassenabhängigkeit und den Zusammenhang mit dem chiralen Kondensat nach der $U_A(1)$-Ward-Identität [50] [8]

$$\chi \simeq \frac{1}{N_f} \langle \sum_f m_{q,f} \bar{\psi}_f \psi_f \rangle \ , \tag{3.7.3}$$

da beide Seiten der Gleichung der stochastischen Schätzung von Quarkloops zugänglich sind.

3.8 Topologische Ladung und Teilchenmassen

Die Verbindung von η'-Masse, der $U(1)$-Anomalie und den topologischen Eigenschaften des Vakuums wirft die Frage auf, wie sich Messungen von η' und Observablen des leichten Spektrums auf Konfigurationssamples mit unterschiedlicher topologischer Ladung relativ zueinander verhalten.
Für das η' wurden in [73] auf quenched Konfigurationen bereits größere Massen auf Konfigurationen mit höherem Betrag der topologischen Ladung gemessen. Für das leichte Mesonoktett und das leichte Baryondekuplett ist dieser Zusammenhang im Prinzip offen. Im folgenden werden geschmierte η'-Observable und effektive Massen des leichten Spektrums auf Teilensembles der SESAM-Konfigurationen mit definierter topologischer Ladung betrachtet. Um auf allen Konfigurationssamples eine ausreichende Statistik zu gewährleisten, wurden die Konfigurationen lediglich in Ensembles mit $|Q| \leq 1.5$ (top01) und $|Q| > 1.5$ (top24) unterteilt. Wir beschränken uns auf die Darstellungen auf SESAM-Konfigurationen mit $\kappa_{sea} = 0.1575$. Für andere Quarkmassen ergeben sich qualitativ gleiche Zusammenhänge.

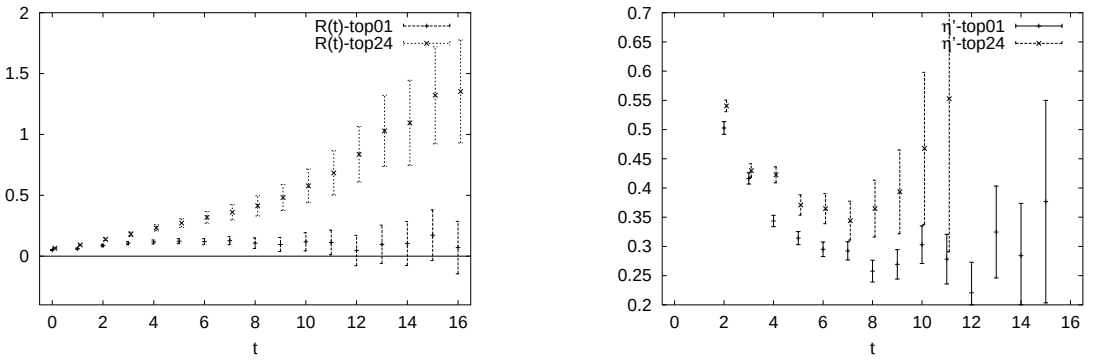

Abbildung 3.29: $R(t)$ (links) und eff. η'-Massen

[8] Vorläufige Analyse der UKQCD-Daten in [72].

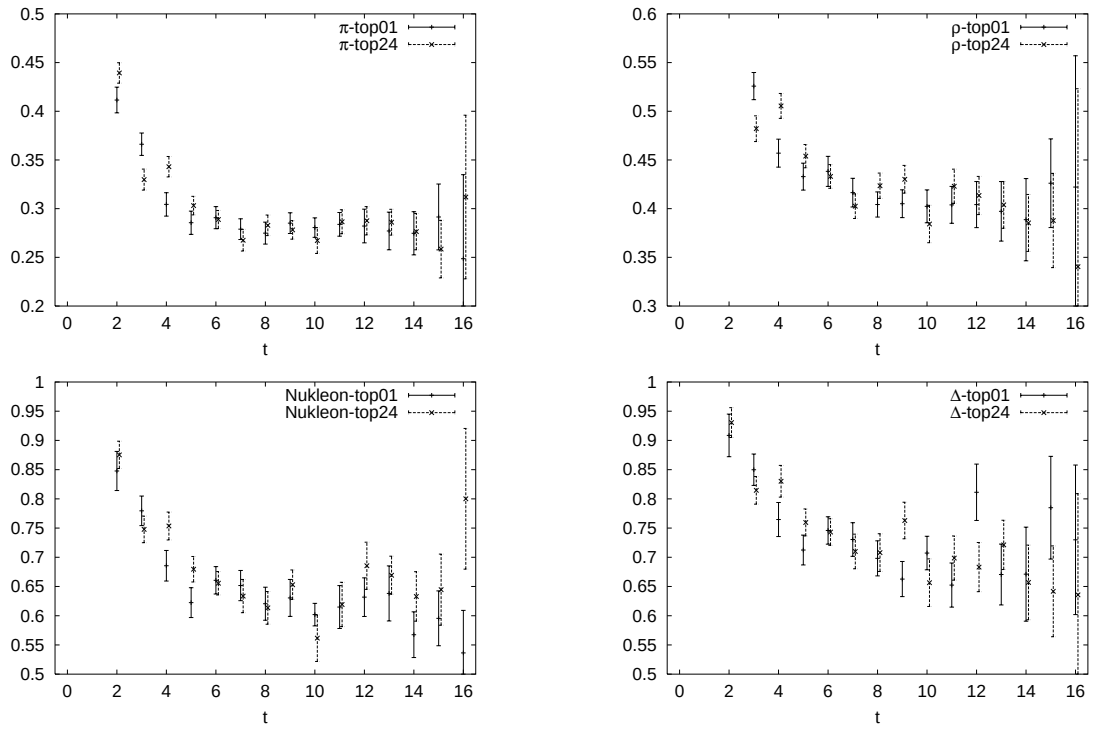

Abbildung 3.30: Effektive π-, ρ-, Nukleon- und Δ-Massen

3.8.1 η'-Observable

Die erste Analyse richtet sich auf η'-Observable. Im Bild der Symmetriebrechung durch Instantoneffekte ist eine Korrelation mit der Gesamtanzahl von Instantonen und Antiinstantonen zu erwarten. Die topologische Ladung als Differenz dieser Anzahlen gibt auf den einzelnen Konfigurationen indirekt Hinweise über die jeweilige Gesamtanzahl. In Abb. 3.29 sind die Verhältnisse $R(t)$ von disconnected und connected Korrelatoren, sowie effektive η'-Massen gezeigt. Auf den $|Q| > 1.5$-Konfigurationen sind deutlich größere Signale beider Observablen zu sehen. Der erwartete qualitative Zusammenhang zwischen Observablen und topologischer Ladung wird im Rahmen unser Statistik bestätigt.

3.8.2 Das leichte Massenspektrum

In diesem Abschnitt betrachten wir in Abb. 3.30 effektive Massen von π, ρ, Nukleon und Δ auf denselben topologischen Subsamples. Es zeigen sich im Rahmen unser Statistik keine Massendifferenzen zwischen den Konfigurationsensembles. Eine Verbindung zwischen Topologie des Eichfelds und Hadronmassen wäre beispielsweise durch Instanton-Flüssigkeits-Modelle [74] gegeben. In diesem Ansatz erhalten Hadronen ihre Massen durch Streuung der propagierenden Quarks an Instantonen. Die topologische Ladung einer Konfiguration als Raum-Zeit-Integral der Instantondichte liefert über das Auftreten solcher Streuprozesse natürlich nur indirekte Information.

3.9 Zusammenfassung

Zusammenfassend läßt sich über die Analyse auf unseren SESAM/TχL-Gittern, sowie dem quenched Referenzsample sagen:

- In Tab. 3.4 sind die Werte der extrapolierten Massen bei κ_l in Gittereinheiten und MeV angegeben. Zum Vergleich der Ergebnisse der Analyse mit dynamischen Fermionen werden die experimentellen '$N_f = 3$-Werte' und die auf $N_f = 2$ extrapolierten Vergleichswerte (Exp.) angegeben. Die auf den SESAM/TχL-Konfigurationen gemessenen Werte von m_0 und $m_{\eta'}$ liegen um $15 - 25$ Prozent unter den aus dem Experiment abgeleiteten Werten nicht reproduziert.
  Im unteren Teil der Tabelle werden die auf $N_f = 3$ extrapolierten m_0-Resultate der quenched Analyse angegeben. Diese Extrapolationen liegen um ca. 30 Prozent unter den experimentellen Werten. Diese niedrigen Gitterwerte können

Tabelle 3.4: η'- und m_0-Fitresultate

Ensemble	Fit	$m_{\eta'}$	m_0	$M_{\eta'}$	M_0
'$N_f = 3$'	Exp.	-	-	958	860
$N_f = 2$	Exp.	.311(9)	.305(8)	716	702
$N_f = 2$	m-ll	.267(23)	.251(43)	615(53)	576(99)
$N_f = 2$	m^2-ll	.239(37)	.245(40)	551(85)	565(92)
$N_f = 2$	m-sm	.255(19)	.205(43)	587(44)	472(99)
$N_f = 2$	m^2-sm	.226(25)	.222(26)	520(58)	510(62)
quenched	m-sm	-	.267(22)	-	603(49)
quenched	m^2-sm	-	.261(20)	-	589(45)

  neben möglichen $O(a)$-Effekten durch die naive Extrapolation der experimentellen Werte in die $N_f = 2$-Welt im Rahmen des Witten-Veneziano-Modells bedingt sein.

- Stochastische Estimation mit geschmierten Operatoren liefert Anzeichen für Plateaus in den effektiven η'-Massen, welche als Grundzustandssignale gedeutet werden können. Somit können η'-Massen aus direkten Fits der Propagatoren ermittelt werden.

- Finite-Size-Effekte wurden bei $\kappa = 0.1575$ auf SESAM- und TχL-Gittern nicht beobachtet.

- Die η'-Observablen zeigen auf Samples mit höheren topologischen Ladungen größere Signale und genügen so qualitativ dem Bild der Generierung der Massendifferenz durch Anomaliebeiträge.

- Eine alternative Meßmethode der topologischen Ladung einer Konfiguration könnte auf ungekühlten Konfigurationen durch Stochastische Estimation von $Sp(\gamma_5 M^{-1})$ gegeben sein.

- Stochastische Estimation mit lokalen Quellen liefert im Rahmen unserer Statistik schlechtere Grundzustandssignale des η'.
- Die Volume-Source-Methode zeigt in unserer Analyse deutlich rauschigere disconnected Signale als die Stochastische Estimation.
- Einschränkend ist zu bemerken:
  - $N_f = 2$-Simulationen lassen sich nicht direkt mit physikalischen Meßgrößen vergleichen.
  - Die Quarkmassen unserer Simulationen könnten zu groß für verläßliche chirale Extrapolationen sein.
  - Weitere Vorschläge zur Signalverbesserung des disconnected Korrelators, welche auf der Subtraktion von spurfreien Elementen von Störungsentwicklungen basieren [67], [68] konnten im Rahmen dieser Arbeit nicht aufgegriffen werden.
  - Da wir auf eine feste Kopplung β beschränkt sind, kann keine Kontinuumsextrapolation durchgeführt werden. Die fehlende Übereinstimmung mit den 'experimentellen Werten' kann in dem Sinne ein $O(a)$-Effekt sein.

Kapitel 4

String-Breaking-Signale in der vollen QCD

In diesem Abschnitt werden Strings, in diesem Zusammenhang Bindungszustände eines statischen Quark-Antiquark-Paares mit endlicher Ausdehnung, betrachtet. Das Brechen des Strings, String-Breaking, bei großen Bindungsenergien, d.h. großen Quark-Antiquark-Abständen, ist ein wesentlicher qualitativer Unterschied zwischen Valenzquark-Näherung und der QCD mit dynamischen Fermionen. Nur in der vollen QCD ist nämlich durch Effekte leichter Seequarkpaare für Abstände oberhalb der Massenschwelle von 2 Static-Light-Mesonen String-Breaking möglich.
In diesem Kapitel werden mit Standardtechniken erreichbare relative Fehler bzw. Signal-Rausch-Verhältnisse von Observablen zur String-Breaking-Analyse auf Gittern der SESAM/TχL-Simulationen untersucht. Die Beobachtung dieses Phänomens wird hier im Rahmen einer Mischungsanalyse von 2 Gitter-Operatoren, dem statischen Quark-Antiquark- und dem 2-Static-Light- bzw. 4-Quark-Operator, aufgefaßt. Es werden die relativen statistischen Fehler von Wilsonloop-Operator und Übergangsmatrixelementen, sowie mögliche Verbesserungsansätze und deren Rauschreduktionen diskutiert. [1].

4.1 Einleitung und theoretische Ansätze

In diesem Abschnitt wird kurz auf die Messung des statischen Quark-Antiquark-Potentials mit Wilsonloops und deren Probleme beim Aufzeigen des String-Breakings eingegangen. Die Grundlagen des in dieser Arbeit verfolgten Ansatzes, der Betrachtung des String-Breakings im Rahmen einer Analyse der Mischung von statischem Stringzustand und 'gebrochenen' 4-Quark- bzw. Static-Light-Meson-Endzustand werden anschließend vorgestellt. Ziel ist die Betrachtung des Mischungsphänomens im Rahmen eines verallgemeinerten Eigenwertproblems auch für kleine Zeitabstände.

[1] Überblick über String-Breaking-Analysen auf dem Gitter in [32].

4.1.1 String-Breaking mit Wilsonloops?

Das attraktive Zentralpotential zwischen statischen Quark-Antiquark-Paaren läßt sich anhand zweier Grenzwerte charakterisieren. Für kurze Abstände r, d.h. hohe Energien, führt eine Entwicklung in der schwachen Kopplungskonstanten auf einen attraktiven Coulombterm mit effektiver Wechselwirkung e. Für große, im Rahmen der laufenden Kopplung nichtstörungstheoretische Abstände, erwartet man über die Bildung des Strings, eines Flussschlauchs mit konstanter Energiedichte, zwischen den Quarks eine linear mit dem Abstand anwachsende Wechselwirkungsenergie mit Stringspannung σ. Es zeigt sich Confinement, Quarks können demnach nicht isoliert beobachtet werden.
Dieser Ansatz mit einem zusätzlichen Absolutglied V_0, das Cornell-Potential,

$$V(R) = V_0 - \frac{e}{r} + \sigma r \tag{4.1.1}$$

wurde sowohl in quenched Analysen [22], [23], als auch in unquenched Simulationen [24], [25], [26], [27], [83] bestätigt.
Während diese Übereinstimmung für quenched Analysen den Erwartungen entspricht, sollte dies in Simulationen der vollen QCD ab einem bestimmten Brechungsabstand r_b nicht mehr gelten. Durch die Berücksichtigung von Vakuumpolarisationen im Pfadintegral wird erwartet, daß dann virtuelle, leichte Quark-Antiquark-Paare mit dem statischen Paar zu einem energetisch günstigeren Meson-Antimeson-Paar mit geringer Wechselwirkung kondensieren. Dieses Aufbrechen des Strings, das String-Breaking, ist somit eine wesentliche qualitative Unquenchingeigenschaft, die Grundzustandsenergie des Potentials sollte demnach nicht ins Unendliche anwachsen, sondern im Bereich des Brechungsabstandes in ein Plateau mit der Energie von 2 Mesonen übergehen. Ein Abflachen des Potentials in der vollen QCD konnte in [24], [26], [27], [83] innerhalb der Fehler nicht beobachtet werden. Ein neuere Analyse der TχL-Gitter mit deutlich höherer Statistik [25] schließt dieses Verhalten im erwarteten r_b-Bereich aus.
Anzumerken ist hier, daß, in der QCD bei endlicher Temperatur durch Betrachtung von Polyakovloops, über die periodischen Randbedingungen geschlossene Eichfeldlinien, Anzeichen von String-Breaking gesehen wurden [76], [77]. Ähnliche Anzeichen zeigen Analysen mit statischen Quarks in der adjungierten Darstellung [78], [79].
Es wurde die Vermutung geäußert [28], daß die ausstehende Beobachtung dieses Phänomens in $T = 0$-QCD durch den schlechten Überlapp des Meßoperators mit dem 2-Mesonzustand bedingt ist. Bevor wir uns in den folgenden Abschnitten mit den Konsequenzen dieser Vermutung befassen, stellen wir hier zuerst die den obigen Analysen zugrunde liegende Potentialbestimmung über Erwartungswerte von Wilson-Loops dar.
Wilson-Loops $W(r,t)$,

$$W(r,t) = \langle Re(Sp(\Pi_\gamma U_\gamma)) \rangle \ , \tag{4.1.2}$$

sind geordnete Produkte von Eichlinks entlang eines geschlossenen und damit eichinvarianten Pfades γ mit Eckpunkten (r_0, t_0), $(r_0 + r, t_0)$, $(r_0 + r, t_0 + t)$, $(r_0, t_0 + t)$. Das physikalische Bild ergibt sich aus der Betrachtung der Erzeugung eines statischen

Quark-Antiquark-Paares zum Zeitpunkt t_0 und deren instantanter Trennung auf die Punkte (r_0, t_0) und $(r_0 + r, t_0)$. Mit dem Begriff Statischer Limes ist der Grenzwert unendlicher Quarkmassen gemeint, in dem u.a. der Quarkspin bedeutungslos wird und eine räumliche Propagation der Quarks unterdrückt wird. Der eichinvariante Erzeugungsoperator eines räumlich getrennten Quark-Antiquark-Paares ist so mit dem pfadgeordneten ($\mathcal{P}$) Eichlink in räumlicher Richtung

$$U(r_0, t_0|r_0 + r, t_0) = \mathcal{P}\left[exp\left(ig\int_{r_0}^{r_0+r} dy A_\mu(y, t_0)\right)\right] \tag{4.1.3}$$

gegeben durch

$$\bar{Q}(r_0, t_0)U(r_0, t_0|r_0 + r, t_0)Q(r_0 + r, t_0)\ . \tag{4.1.4}$$

Die Zeitentwicklung dieses Zustands wird im Statischen Limes bestimmt durch den statischen Quarkpropagator (analog zu 4.1.3)

$$U(r_0, t_0|r_0, t_0 + t) = \mathcal{P}\left[exp\left(ig\int_{t_0}^{t_0+t} dy A_\mu(r_0, y)\right)\right] = \Pi_{\tau=t_0}^{t_0+t-1} U_4(r_0, \tau)\ . \tag{4.1.5}$$

Insgesamt ergibt sich mit dem entsprechenden Vernichtungsoperator auf der Zeitschicht $t_0 + t$ der Wilsonloop als Beschreibung der Zeitentwicklung eines statischen Quark-Antiquarkpaares. Aus dem Wilsonloop können für $t \to \infty$ der Grundzustand $V_0(r)$ und die Überlappfunktionen $C_0(r)$ über

$$W(r, t) = \sum_n C_n(r)exp(-V_n(r)t) \to_{(t\to\infty)} C_0(r)exp(-V_0(r)t) \tag{4.1.6}$$

bestimmt werden.

4.1.2 String-Breaking als Mischungsphänomen

Die Betrachtung des String-Breaking im Rahmen einer Mischung von Wilson-Loop- und 4-Quark-Operator wurde in [29] theoretisch ausgeführt.
Die Grundzüge dieses Ansatzes werden im folgenden dargestellt. Der statische Quark-Antiquark- bzw. Stringzustand S ist durch den Erzeugungsoperator 4.1.4 bestimmt. 4-Quark- bzw. 2-Meson-Zustände M (Operatoren $q/\bar{q}$ für leichte Quarks) werden erzeugt durch

$$\bar{Q}q(r_0, t_0)\ \bar{q}Q(r_0 + r, t_0)\ . \tag{4.1.7}$$

Die Zeitentwicklung dieser gekoppelten Zustände $G(t)$ ergibt sich mit der Transfermatrix T zu

$$G(r, t + 1) = TG(r, t) \equiv T\begin{pmatrix} G_{SS} & G_{SM} \\ G_{MS} & G_{MM} \end{pmatrix}(r, t)\ . \tag{4.1.8}$$

Die Matrixelemente von $G(r, t)$ sind in 4.1.2 skizziert. Geschwungene Linien stehen hier für Propagatoren leichter Quarks, 'glatte' Linien für statische Quarkpropagatoren.

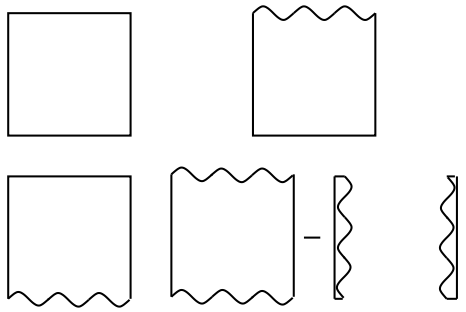

Abbildung 4.1: Matrixelemente des 2-Zustandssystems

Explizit sind die einzelnen Matrixelemente dann folgendermassen zu bestimmen[2]: Der String-String-Korrelator G_{SS} (links oben) entspricht dem Wilsonloopoperator 4.1.2

$$\begin{aligned} G_{SS}(0,0|r,t) &= <0|T\{(\bar{Q}(0,t)U(0,t|r,t)Q(r,t))^{\dagger}(\bar{Q}(0,0)U(0,0|r,0)Q(r,0))\}|0> \\ &= U(0,0|r,0) * U(r,0|r,t) * U(r,t|0,t) * U(0,t|0,0). \end{aligned} \tag{4.1.9}$$

Für die Übergangsmatrixelemente G_{SM} und G_{MS} gilt mit dem Propagator M^{-1} des leichten Quarks

$$\begin{aligned} G_{SM}(0,0|r,t) &= <0|T\{(\bar{Q}(0,t)U(0,t|r,t)Q(r,t))^{\dagger}(\bar{Q}q(0,0)\ \bar{q}Q(r,0))\}|0> \\ &= U(0,0|0,t) * U(0,t|r,t) * U(r,t|r,0) * M^{-1}(r,0|0,0) \\ &= G^{*}_{MS} = G_{MS}\ . \end{aligned} \tag{4.1.10}$$

Das 4-Quark-Matrixelement (rechts unten) besteht aus 2 Diagrammen, einem Meson-Antimeson-Korrelator und dem Loop-Diagramm.

$$\begin{aligned} G_{MM}(0,0|r,t) &= <0|T\{(\bar{Q}q(0,t)\ \bar{q}Q(r,t))^{\dagger}(\bar{Q}q(0,0)\ \bar{q}Q(r,0))\}|0> \\ &= U(0,0|0,t) * M^{-1}(0,t|r,t) * U(r,t|r,0) * M^{-1}(r,0|0,0) \\ &- [U(0,0|0,t) * M^{-1}(0,t|0,0)] * [U(r,t|r,0) * M^{-1}(r,0|r,t)]\ . \end{aligned} \tag{4.1.11}$$

In diesem Bild ist die Transfermatrix mit der Stringpropagation s, der Propagation des 4-Quark-Zustands m und der Übergangswechselwirkung u gegeben durch

$$T \equiv \begin{pmatrix} s & \sqrt{smu} \\ \sqrt{smu} & m \end{pmatrix}\ . \tag{4.1.12}$$

Anzumerken ist hier, daß die Messung der Elemente von $G(r,t)$ durch Operatoren mit unterschiedlicher Normierung (z. B. durch Smearing oder Link-Smearing, siehe unten) natürlich keinen Einfluß auf die Energieeigenwerte der Transfermatrix hat. Aus der Eigenwertdarstellung mit den Eigenwerten

$$\lambda_{\pm} = 1/2\{(s+m) \pm \sqrt{(s-m)^2 + 4smu^2}\} \tag{4.1.13}$$

[2]Spuren über Spin- und Colorfreiheitsgrade werden hier zur besseren Übersichtlichkeit implizit ausgeführt.

und dem Mischungswinkel

$$tan\theta = \frac{m - s + \sqrt{(s-m)^2 + 4smu^2}}{2\sqrt{sm}u} \tag{4.1.14}$$

läßt sich dann über die Eigenwertbasis

$$T = O \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} O^{-1} \ , \ O \equiv \begin{pmatrix} cos\theta & sin\theta \\ -sin\theta & cos\theta \end{pmatrix} \tag{4.1.15}$$

die Zeitentwicklung der Matrix $G(t)$

$$G(t) = T^{t-t_0} G(t_0) = O \begin{pmatrix} \lambda_+^{t-t_0} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{t-t_0} \end{pmatrix} O^{-1} G(t_0) \tag{4.1.16}$$

mit den Energieeigenzuständen

$$E_\pm = -ln\lambda_\pm \tag{4.1.17}$$

herleiten.
In [29] wurde durch Betrachtung der Transfermatrixeinträge in der 'Strong-Coupling-Näherung' gezeigt, daß für $r \ll r_b$, d.h. $m \ll s$, starke Überlapps des E_+-Eigenvektors mit G_{SS}, sowie des E_--Eigenvektors mit G_{MM} vorliegen. Bei großen Abständen $r_b \ll r$ ($s \ll m$)kehrt sich die Situation um, der E_+-Eigenvektor ist jetzt hauptsächlich durch G_{MM}, der E_--Eigenvektor durch G_{SS} gegeben. G_{SS} mißt also in diesen Abstandsbereichen im wesentlichen die Stringpropagation s und G_{MM} die 4-Quark-Propagation m. Die wirkliche Beobachtung des Stringbreakings wäre so auf den Bereich $r \approx r_b$ mit starker Mischung von String- und 2-Meson-Zustand beschränkt. Die Breite des Mischungsbereiches wird durch die Übergangswechselwirkung $\Delta r \sim u$ bestimmt. In der quenched Näherung sollte diese Größe wegen fehlender Vakuumpolarisation unterdrückt sein, die Zustandsüberlapps also durch Stufenfunktionen an $r = r_b$ gegeben sein. Qualitativer Unterschied der vollen QCD ist also ein endlicher Bereich der Zustandsmischungen und eine endliche Aufspaltung der Eigenwerte bei

$$r = r_b \Leftrightarrow s = m \Leftrightarrow \lambda_+ - \lambda_- = 2su = 2mu \ . \tag{4.1.18}$$

Zur Identifikation von Energieeigenzuständen und Zustandsprojektionen hat es sich bewährt, ausgehend von einer Zeitschicht t_0 die Zeitentwicklung der Korrelationsmatrix $G(t)$ als verallgemeinertes Eigenwertproblem [80] aufzufassen. Im Rahmen von $SU(2)$-Higgsmodellen wurden Gitteranalysen mit analogem Ansatz [30], [31] explorativ ausgeführt.

4.1.3 Verallgemeinertes Eigenwertproblem

Allgemein läßt sich die Zeitentwicklung von 'zusamenhängenden' Matrixelementen G_{ij} natürlich mit den Energieeigenwerten E_α und den Eigenzustandsprojektionen

$c_{i\alpha}$ beschreiben als

$$\begin{aligned} G_{ij}(t) &\equiv < O_i^*(t) O_j(0) >_c \\ &= \sum_{\alpha=0}^{\infty} < 0|O_i^*|\alpha >< \alpha|O_j|0 > exp(-E_\alpha t) \\ &= \sum_{\alpha=0}^{\infty} c_{i\alpha}^* c_{j\alpha} exp(-E_\alpha t) \ . \end{aligned} \tag{4.1.19}$$

Zur Extraktion der Energieeigenzustände für kleine Zeiten betrachtet man das verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$G(t)v_\alpha = \lambda_\alpha(t, t_0) G(t_0) v_\alpha \ . \tag{4.1.20}$$

Die Energien lassen sich dann aus

$$E_\alpha = ln(\lambda_\alpha(t-1, t_0)/\lambda_\alpha(t, t_0)) + \mathcal{O}(exp(-\Delta E_\alpha t)) \tag{4.1.21}$$

bestimmen. Entscheidend für die zuverlässige Extraktion von Eigenenergien bei kleinen Zeiten t ist nun, den Korrekturterm $\mathcal{O}(exp(-\Delta E_\alpha t))$ mit der Energiedifferenz ΔE_α durch Konstruktion von Zuständen mit besserer Eigenzustandsprojektion zu minimieren. Dies kann wie in [30], [31] durch Implementation jeweils ähnlicher, verschmierter Operatoren zur Messung von 2-Quark- sowie Stringzustand und Diagonalisierung der entsprechenden Untermatrizen von $G(t)$ erfolgen.

4.1.4 Welche Signalqualitäten sind möglich?

In dieser Machbarkeitsstudie konzentrieren wir uns auf die Evaluation von mit Standardmethoden erreichbaren Signalqualitäten der Matrixelemente von $G(t)$ und zeigen Ansätze für mögliche Verbesserungen auf. Als schwer zugänglich zeigt sich in diesem Rahmen der 4-Quark- bzw. 2-Meson-Operator wegen der erforderlichen Berechnung von leichten Quarkpropagatoren auf vielen Quellen. Im folgenden wird nach der Massenbestimmung von Static-Light-Mesonen kurz die 'naive' Potentialbestimmung auf SESAM/TχL-Gittern mit der Wilsonloopmethode auf 'link-geschmierten' Konfigurationen als Standardmethode vorgestellt. Aus den so erhaltenen Wilsonlooppotentialen und den Massen zweier Static-Light-Mesonen wird der erwartete Stringbrechungsabstand r_b bestimmt. Auf geeigneten $24^3 \times 40$-Gittern wird dann das Übergangsmatrixelement $G_{SM}(r, t)$ gemessen. Neben der Ausnutzung von Gittersymmetrien wird die Benutzung geschmierter Quellen als Signalverbesserungsmethode vorgeschlagen. Eine explorative Messung des 4-Quark-Operators $G_{MM}(r, t)$ bei festem $r = 3$ und lokalen Quellen liefert jedoch kein signifikantes Signal. Die Messungen von Matrixelementen und Berechnung von statischen Propagatoren wurden auf der CRAY-T90, die Berechnung der leichten Quarkpropagatoren auf der CRAY-T3E des NIC Jülich durchgeführt.

4.2 Bestimmung des Brechungsabstandes r_b

In der vollen QCD kann der Quark-Antiquark-String oberhalb der Massenschwelle durch Vakuumpolarisationseffekte in 2 Static-Light-Mesonen brechen. Der Brechungs- bzw. Überlappabstand r_b, in dessen Bereich die oben beschriebenen Mischungsphänomene beobachtbar sein sollten, ergibt sich bei Vernachlässigung der Mesonwechselwirkungsenergie im 4-Quark-Zustand direkt aus der Massenschwelle des Wilsonlooppotentials

$$V(r_b) \simeq m_{sl1} + m_{sl2} \ . \tag{4.2.1}$$

4.2.1 Static-Light-Mesonmassen

Als erster Schritt zur Bestimmung von r_b werden auf allen SESAM/TχL-Gittern die Massen der möglichen Endzustände bestimmt. Wie oben beschrieben, entspricht der Propagator des schweren Quarks im Statischen Limes dem zeitgeordneten Produkt der Gitter-Link-Variablen. Dieser statische Propagator wird mit einem leichten Quarkpropagator mit $\kappa_{Val} = \kappa_{See}$ zum Static-Light-Meson kombiniert. Zur Grundzustandssignalverbesserung wurden die Propagatoren mit verschmierter Quelle (eichinvariantes Wuppertal-Smearing, siehe Kapitel 3) gerechnet. Die Massen der Static-Light-Mesonen wurden aus einfachen Exponentialfits an ihre Korrelationsfunktionen entnommen. Mit der Spinstruktur des leichten Propagators lassen sich Pseudoskalar $PS(t)$ und Skalar $S(t)$ [3]

$$\begin{aligned} PS(t) &= U(x,0|x,t) * Tr(\frac{1+\gamma_0}{2}\gamma_5 M^{-1}(x,t|x,0)\gamma_5) \\ &= U(x,0|x,t) * Tr(\frac{1+\gamma_0}{2} M^{-1\dagger}(x,0|x,t)) \end{aligned} \tag{4.2.2}$$

$$\begin{aligned} S(t) &= U(x,t|x,0) * Tr(\frac{1-\gamma_0}{2} M^{-1}(x,0|x,t)) \\ &= U(x,0|x,t)^\dagger * Tr(\frac{1-\gamma_0}{2} M^{-1}(x,0|x,t)) \\ &= Tr(M^{-1\dagger}(x,0|x,t)\frac{1-\gamma_0}{2}) * U(x,0|x,t) \ . \end{aligned} \tag{4.2.3}$$

identifizieren. Anhand von Plateaus der effektiven Massen wurden die Fitbereiche der jeweiligen Grundzustände bestimmt. Für die Pseudosklare können nach Abb. 4.2 Massen im Fitbereich $8 \leq t \leq 12$, für die Skalare nach Abb. 4.3 Massen bei $5 \leq t \leq 9$ extrahiert werden. Die entsprechenden Werte sind mit Angaben zum jeweiligen Ensemble in Tab. 4.1 angegeben. Skalare Teilchen haben ein größere Masse als Pseudoskalare. Da als Zerfallszustände möglicherweise 2-Meson-Zustände mit gemischter Parität in Betracht kommen können, kann so ein größerer Quark-Antiquark-Abstand zur Brechung nötig sein. Problematisch kann zudem auch die Übertragung von durch Quantenzahlen erlaubten Gitterzerfällen in physikalische

[3] Die explizite Spurbildung bezieht sich auf die Dirac-Spur, Colour-Spuren werden implizit ausgeführt.

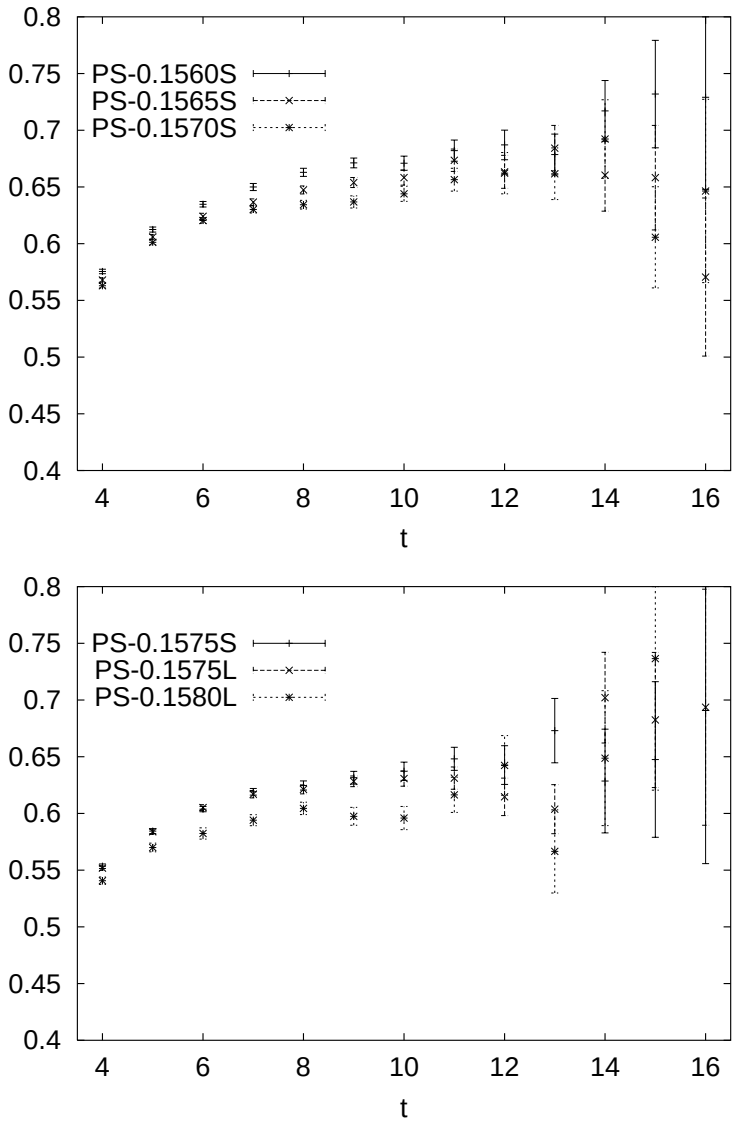

Abbildung 4.2: Lokale Massen der 'Static-Light'-Pseudoskalare

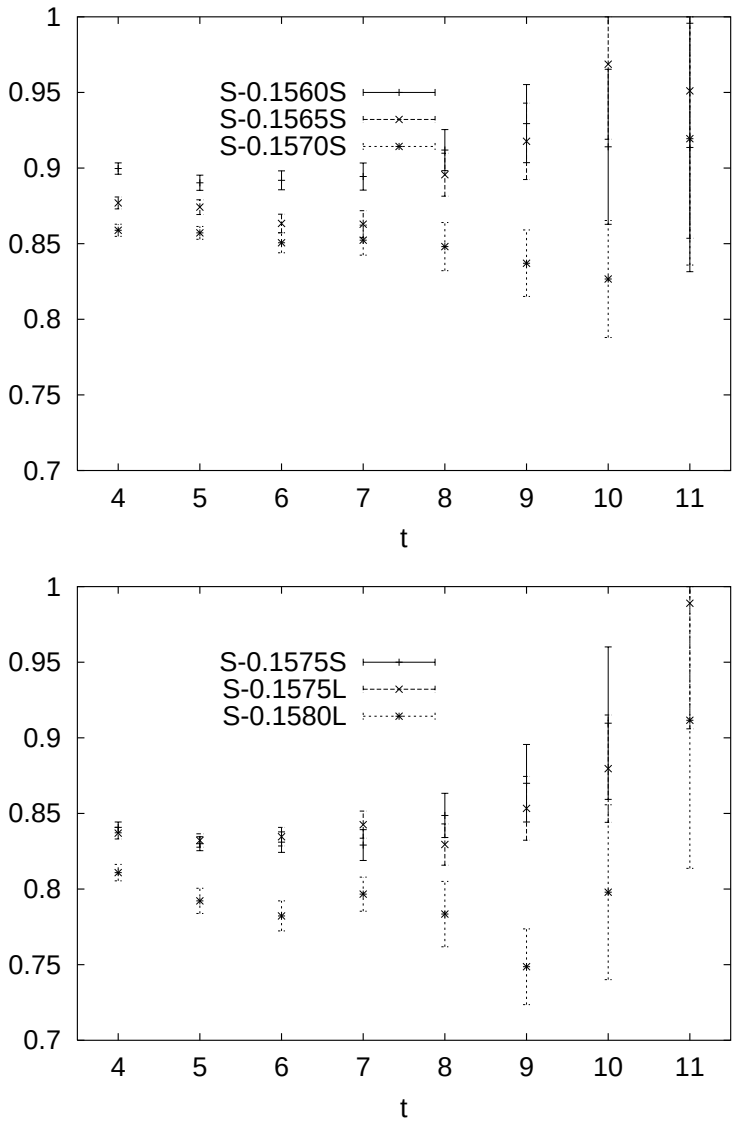

Abbildung 4.3: Lokale Massen der 'Static-Light'-Skalare

κ	L	$2m_{PS}$	$m_{PS}+m_S$	$2m_S$
0.1560	16	1.353(13)	1.581(14)	1.808(16)
0.1565	16	1.324(14)	1.542(16)	1.759(19)
0.1570	16	1.296(16)	1.497(17)	1.697(18)
0.1575	16	1.279(15)	1.479(18)	1.680(22)
0.1575	24	1.256(13)	1.466(15)	1.677(18)
0.1580	24	1.219(26)	1.392(29)	1.564(33)

Tabelle 4.1: Static-Light-Meson-Massen

Übergänge von Bottom-Systemen sein, da der Statische Limes ein unphysikalischer mit Entkopplung der Spinfreiheitsgrade der statischen Quarks ist.

4.2.2 Messung des Statischen Potentials

Das statische Quark-Antiquark-Potential wurde mit Wilson-Loop-Operatoren auf den SESAM- [24] und TχL-Konfigurationen [83], [25] gemessen.
Zur Signalverbesserung von gluonischen Links hat sich die Verwendung des 'APE-Smearing' [81] etabliert. Die räumlichen Links $U_i(x)$ werden in diesem Verfahren iterativ durch eine wieder auf $SU(3)$-Matrizen projizierte, gewichtete Summe des originalen Links und seiner 4 benachbarten räumlichen 'Staples' P_{ij} ersetzt

$$\begin{aligned} U_i(x) &\rightarrow Proj_{SU(3)}\left(U_i(x)+\alpha\sum_{j\neq i}P_{ij}(x)\right) \\ P_{ij}(x) &= U_j(x)U_i(x+\hat{j})U_j(x)^{\dagger}(x+\hat{i})\ . \end{aligned} \tag{4.2.4}$$

Observable werden so auf 'link-geschmierten' Konfigurationen gemessen, deren kurzreichweitige Fluktuationen durch diese Summe über benachbarte Staples geglättet sind. Für diese Analyse wurde der Smearing-Parameter $1/\alpha = 2.3$ bei 26 Iterationsschritten verwendet. Das Potential zeigt, wie aus Abb. 4.4 ersichtlich, für große Abstände das erwartete, lineare Verhalten. Hier sind die minimalen Brechungsabstände r_b in Gittereinheiten von Interesse, die aus den Niveaus von $2 * m_{PS}$ zu

$$V(r_b) \simeq 2 * m_{PS} \rightarrow r_b \approx 12 - 15 \tag{4.2.5}$$

abgelesen werden können.
Unsere Simulationen wurden auf Gittern mit periodischen Randbedingungen durchgeführt, was den maximalen Abstand der Potentialmessungen einschränkt. Durch Messung von 'Off-axis'-Wilson-Loops kann dieser Bereich über den in diesem Sinne maximalen 'On-axis-Wert' von $L/2$ ausgedehnt und zudem eine höhere räumliche Auflösung erreicht werden. In den Messungen der Übergangselemente haben wir uns auf die Raumrichtungen

$$(1,0,0),\ (1,1,0),\ (1,1,1),\ (2,2,1) \tag{4.2.6}$$

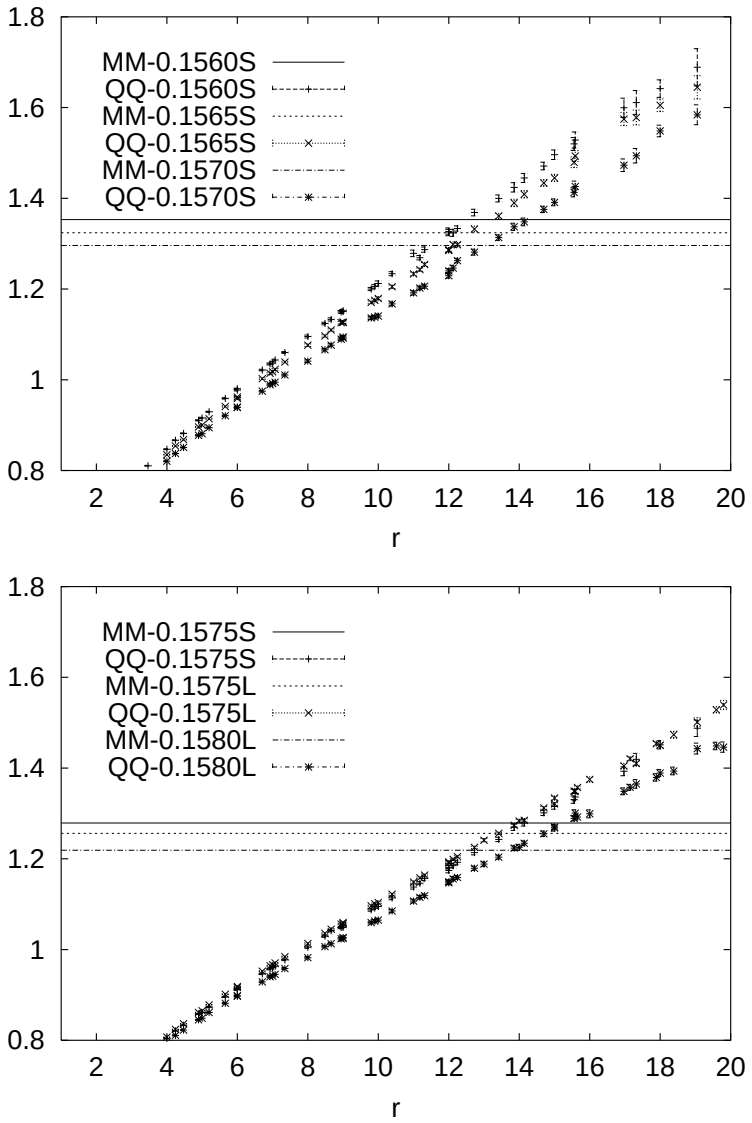

Abbildung 4.4: Statische Quark-Antiquark-Potentiale

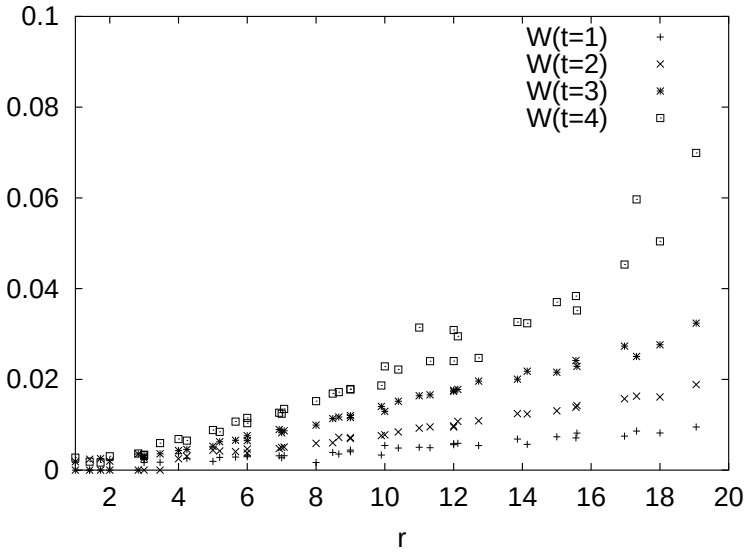

Abbildung 4.5: Rausch-Signalverhältnisse auf Wilson-Loop-Amplituden

mit den maximalen Abständen

$$L/2,\ \sqrt{2} * L/2,\ \sqrt{3} * L/2,\ 3 * L/4 \tag{4.2.7}$$

beschränkt [4], wobei die Eichlinks aus 'Basisvektoren' dieser Richtungen zusammengestetzt wurden. Potentialwerte wurden dann als lokale Massen $ln[G(t)/G(t+1)]$ der Wilsonloopamplituden im jeweiligen Plateaubereich ab $t \approx 4-5$ bestimmt. Die gezeigten Signalqualitäten konnten durch Ausnutzung der Translationsinvarianz des Wilsonloops und somit dessen Berechnung auf und Mittelung über sämtliche Gitterpunkte $L^3 \times T$ der Konfiguration als Aufpunkte erzielt werden.
Aus Abb. 4.4, welches Potentiale und die 2-Pseudoskalar-Massenschwelle zeigt, entnimmt man, daß auf SESAM-Gittern $(16^3 \times 32)$ ein Mischungsbereich im von möglichen Periodizitätseffekten freien Abstandsbereich nicht erreicht werden kann. Selbst auf den TχL-Gittern $(24^3 \times 40)$ mit $r_{max} \approx 20.8$ scheinen 2-Meson-Zustände mit gemischter Parität außerhalb des Meßbereichs zu liegen. Die aus obigen Abbildungen geschätzten Überlappbereiche sind in diesem physikalischen Bild also als minimale Brechungsabstände zu sehen. Die mit diesem Verfahren der Wilsonloopmessung erreichbaren relativen Fehler bzw. Rausch-Signal-Verhältnisse werden für verschiedene Zeiten t in Abb. 4.5 angegeben. In dieser Darstellung beschränkten wir uns auf die Mittelung über die Gitterpunkte einer Zeitschicht, um eine 'faire' Vergleichbarkeit mit den Fehlern der Übergangsmatrixelemente zu gewährleisten. Auf $\mathcal{O}(200)$ Konfigurationen wurde so jeweils der Wilsonloop $W(r,t)$ in der Richtung $\vec{r}$ über alle 24^3 Punkte und alle durch Permutation und Spiegelung äquivalente Richtungen gemittelt. Die pro Konfiguration, Loop, Richtung und Punkt benötigten $SU(3)$-Matrixmultiplikationen stellen im Vergleich zur Rechnung von leichten Quarkpro-

[4] In der Potentialanalyse wurden noch zusätzliche Richtungen gemessen, deren Maximalabstände jedoch unter den jeweiligen minimalen r_b lagen. Deshalb beschränkten wir uns auf obige 'Off-axis'-Richtungen mit den 'On-axis'-Beiträgen als Konsistenzcheck.

pagatoren einen vertretbaren Rechenaufwand dar. Im relevanten Abstandsbereich bewegt sich der relative Fehler z.B. für $t = 2$ im Bereich von 1 Prozent. Durch Mittelung über alle Zeitschichten kann dieser Fehler weiter reduziert werden. State-of-the-Art-Rechnungen von Potentialen in diesem Sinne auf den hier verwendeten Gittern sind in [83] ausgeführt. Eine weitere Verbesserung der Statistik ergibt sich durch Mittelung über sämtliche Punkte auf der Kugelschale mit r oder $|r \pm \delta|$. Eine derartige Analyse auf TχL-Gittern wird in [25] beschrieben.

4.3 Übergangsmatrixelemente

Wesentlicher Aspekt unser Analyse ist die Bestimmung der Übergangsmatrixelemente G_{SM}. Es werden relative Fehler und deren Reduzierung durch Ausnutzung von Gittersymmetrien und Verwendung geschmierter Operatoren betrachtet. Auf den folgenden Ergebnissen aufbauend werden Signale von Übergangsmatrixelementen in [25] angegeben.

4.3.1 Physikalisches Bild und Dirac-Struktur

Die direkte Übertragung von Zerfällen eines statischen Quark-Antiquark-Paares auf dem Gitter in physikalische Zerfälle wie z. B. $\Upsilon(4S) \to B\bar{B}$, siehe [82], ist nicht unproblematisch. Begründet ist dies, wie oben angedeutet, durch die Entkopplung des Spins der schweren Quarks im Statischen Limes. Der Zerfall eines Vektorteilchens in 2 mit relativem Drehimpuls behafteten Pseudoskalare implizierte eine zusätzliche Energieanhebung des Endzustands.
Wegen der Bedeutungslosigkeit des Spins der statischen Quarks ist es sinnvoller sich an den Symmetrien von Anfangs- und Endzustand zu orientieren. Analog zur Behandlung von räumlichen Links zwischen statischen Quarks in der Strong-Coupling-Entwicklung wird so für Eichlinks in Richtung $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ entsprechend der Symmetrieachse mit $\vec{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ ein 'Dirac-Faktor'

$$\tilde{\gamma} = \frac{\vec{n} * \vec{\gamma}}{\| \vec{n} \|_2} \tag{4.3.1}$$

eingeführt. Dies führt mit den statischen Links

$$\tilde{U}(0,0|r,0) \equiv U(0,0|0,t) * U(0,t|r,t) * U^{\dagger}(r,0|r,t) \tag{4.3.2}$$

und dem leichten Quarkpropagator M^{-1} auf die Übergangsamplitude

$$\begin{aligned} G_{SM}(r,t) &= Sp\left(\tilde{\gamma} * M^{-1}(r,0|0,0) * \tilde{U}(0,0|r,0)\right) \\ &= -Sp\left(\tilde{\gamma} * M^{-1\dagger}(0,0|r,0) * \tilde{U}(0,0|r,0))\right) \ . \end{aligned} \tag{4.3.3}$$

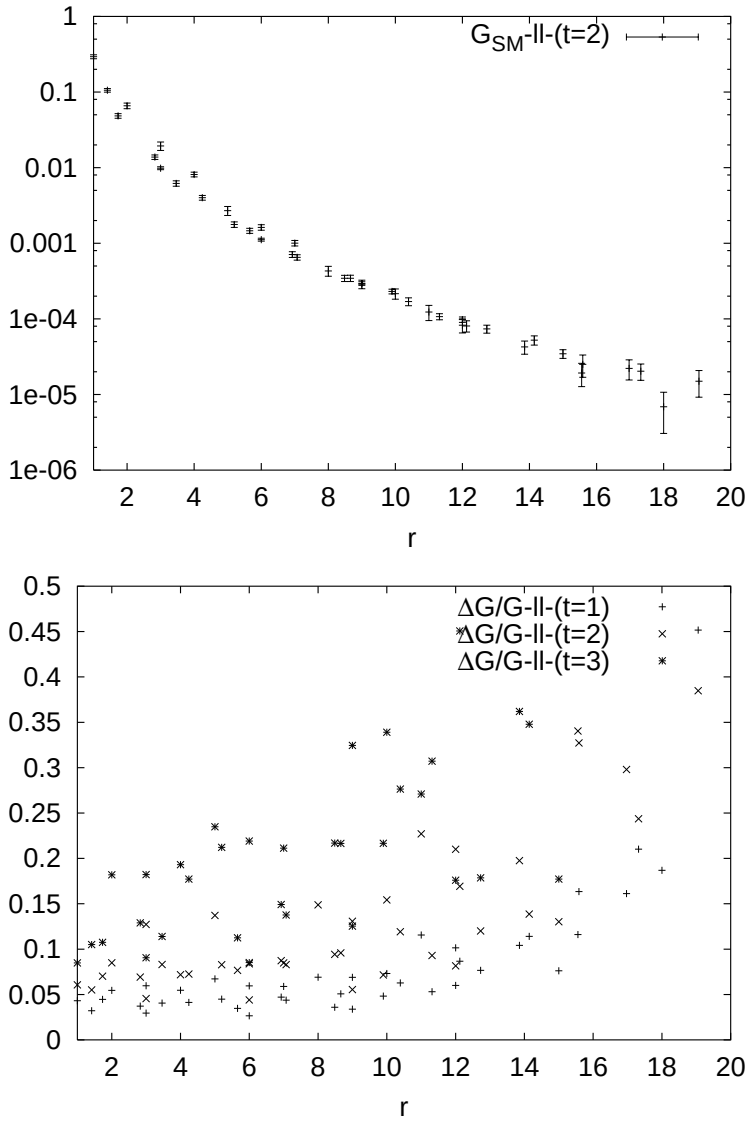

Abbildung 4.6: G_{SM} mit lokalen leichten Quarks

4.3.2 Amplituden und Signalverbesserung

Die statischen Links wurden im folgenden auf link-geschmierten Konfigurationen gemessen. Es ergeben sich je nach Wahl der Quellen verschiedene Kombinationsmöglichkeiten mit leichten Propagatoren.

Lokale Operatoren

Erster Schritt der Analyse war die Kombination von lokalen statischen Links mit leichten Quarkpropagatoren zum Übergangsmatrixelement. Pro Konfiguration, Farb- und Spinfreiheitsgrad wurde hierzu ein lokaler, leichter Quarkpropagator auf einer Punktquelle gerechnet. In Abb. 4.6 sind oben die so im Mittel über 183 Konfiguratio-

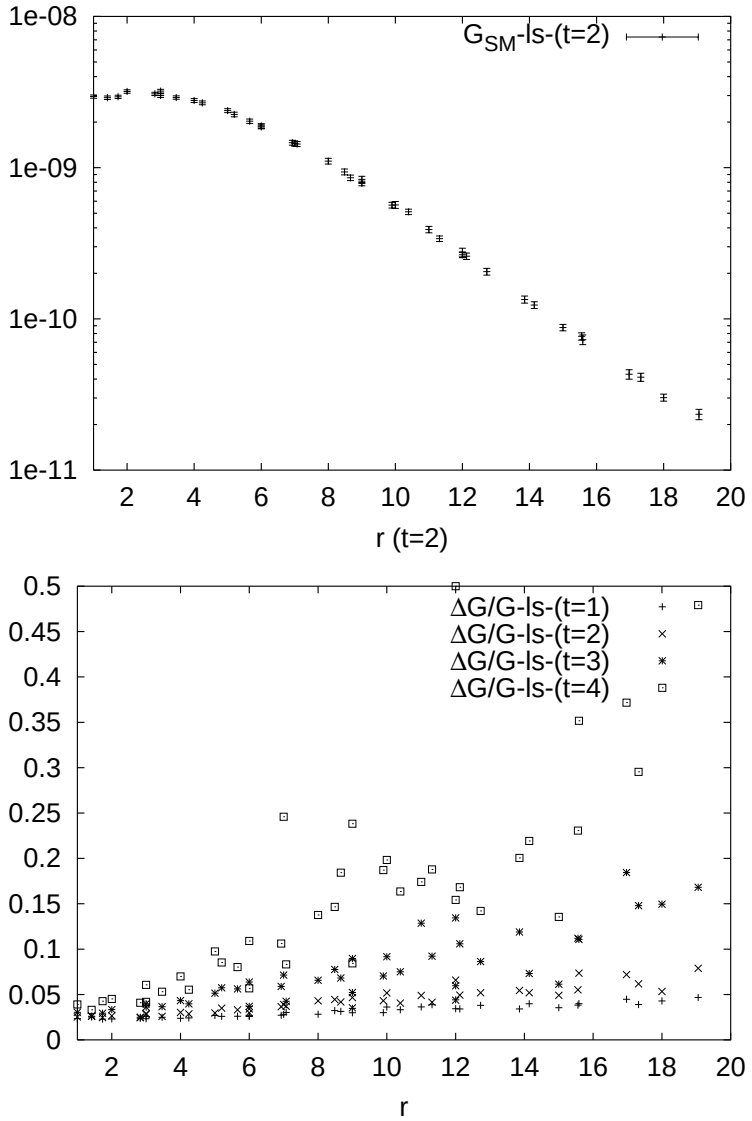

Abbildung 4.7: G_{SM} mit geschmierten leichten Quarks

nen erhaltenen Amplituden für $t = 2$ dargestellt. Es scheint für große Abstände ein exponentieller Abfall der Amplitude mit dem Abstand vorzuliegen. Dieses Verhalten zeigt sich auch für andere Zeiten. Im unteren Teil von Abb. 4.6 sind die relativen Fehler des Signals bis $t = 3$ angegeben, welcher im relevanten Abstandsbereich für $t = 2$ zwischen 10 und 20 Prozent liegt.

Geschmierte Quellen: Nur eine Umnormierung?

Wie in Kapitel 3 beschrieben, ist die Verwendung von eichinvariant geschmierten Quellen eine Standardmethode in Spektrumsrechnungen zur Verbesserung des Grundzustandsüberlapps. In der Berechnung von Übergangsmatrixelementen eröffnen nichtlokale Quellen zudem die Möglichkeit, die Amplitude über einen räumlichen

Bereich mit der Quellstärke gewichtet zu mitteln.
Explizit bedeutet dies: Eine Punktquelle $\phi(z) = \delta(z, y_0)$ wird eichinvariant geschmiert. Unter Verwendung der SESAM/TχL-Parameter der Quellenverschmierung $\alpha = 4.0,\ N_{sm} = 50$ werden Quellen mit gaußförmiger Quellstärkenverteilung und mittlerer Ausdehnung von $r_Q = 3 - 4$ Gitterabstände erzeugt. Mit der Smearing-Matrix $F(x, y)$ erhält man die Quelle $\tilde{\phi}(y) = \sum_z F(y, z)\phi(z) = F(y, y_0)$. Der geschmierte leichte Propagator ergibt sich dann zu

$$\sum_x M(y, x)\xi(x) = \tilde{\phi}(y) \rightarrow \xi(x) = \sum_y M^{-1}(y, x)F(y, y_0) \tag{4.3.4}$$

Der statische Propagator $\tilde{U}(y, x) \rightarrow \tilde{U}_r(x)\delta(y, x - r)$ mit festem Abstand r ergibt sich zu

$$\sum_x \tilde{U}^{-1}(y, x)\chi(x) = \tilde{\phi}(y) \rightarrow \chi(x) = \sum_y \tilde{U}(y, x)F(y, y_0) = \tilde{U}_r(x)F(x - r, y_0)\ . \tag{4.3.5}$$

Die Aufsummation bei festem Abstand r des Produktes ergibt dann

$$\sum_x \xi(x)\chi(x) = \sum_{x,y} \tilde{U}_r(x)F(x - r, y_0) * M^{-1}(y, x)F(y, y_0)\ . \tag{4.3.6}$$

Es werden also auf jedem Gitterpunkt die eichinvariant verschobenen Eichlinks (r, t fest) mit einer Summe von eichinvariant mit y_0 verbundenen leichten Propagatoren kombiniert und aufsummiert. Pro Konfiguration wurde hier wiederum ein leichter, geschmierter Propagator berechnet. Für die hier betrachteten relativ kleinen Quellausdehnungen sollte sich bei großen Abständen eine Glättung des Signals durch Mittelung über die Quellausdehnung ergeben.
In Abb. 4.7 ist oben das so für $G_{SM} = Sp(\tilde{\gamma} * M * \tilde{U})$ erhaltene Signal wiederum für die Zeit $t = 2$ aufgetragen. Für andere Zeiten ergeben sich ähnliche Signale. Unten sind relative Fehler bis $t = 4$ angegeben. Für $t = 2$ läßt sich für die relevanten Abstände ein relativer Fehler im Bereich von 5 Prozent erreichen.
Durch die nichtlokale Quelle, welche auf eine gewichtete Summe über das gesamte Gitter führt, könnten im Prinzip natürlich Kontaminationen des Signals durch Einflüsse kürzerer Abstände entstehen. Diese Beiträge sollten jedoch bei großen Abständen durch den im Vergleich zur annähernd exponentiell abfallenden Amplitude stärkeren Abfall der gaußförmigen 'Quellstärkenverteilung' $F(x, y)$ unterdrückt werden.
In Abb. 4.7 ist für kleine Abstände von der Größenordnung der Quellstärkenhalbwertsbreite eine Abflachung des Signals zu sehen, das auf diese Effekte zurückzuführen sein kann. Für die relativ großen Abstände des erwarteten Mischungsbereichs wird jedoch der exponentielle Abfall von Abb. 4.6 reproduziert. In Abb. 4.8, welche die lokalen und entsprechend normierten, geschmierten Amplituden im relevanten Abstandsbereich für $t = 2$ und $t = 3$ vergleicht, wird qualitativ bestätigt, daß geschmierte Quellen auch für kleine Zeiten hier lediglich auf eine universelle Normierung des Signals mit deutlicher Rauschunterdrückung führen. Eine genauere numerische Analyse der Normierung ist hier wegen der immer noch recht großen relativen Fehler nicht ausgeführt.

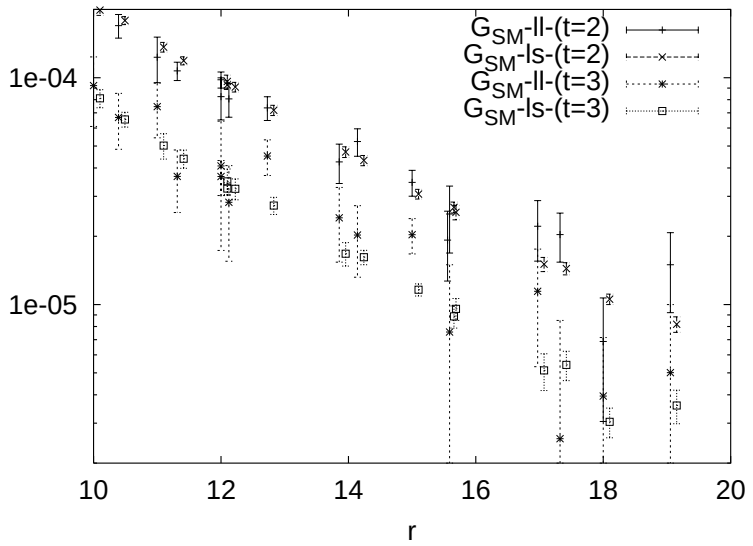

Abbildung 4.8: Lokale (ll) und normierte, geschmierte G_{SM}-Amplitude (ls)

Richtungsmittelung

Unter Ausnutzung von Gittersymmetrien konnte die Amplitude pro Abstand durch Permutationen und Inversionen der Richtungen über

$$(1,0,0) \to 6,\ (1,1,0) \to 12,\ (1,1,1) \to 8,\ (2,2,1) \to 24 \qquad (4.3.7)$$

Meßwerte gemittelt werden. In Abb. 4.9 wird die dadurch erreichte deutliche Rausch-

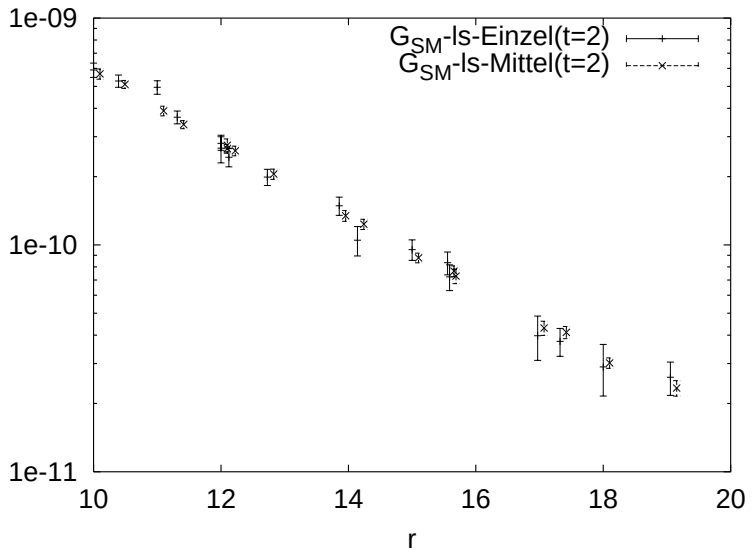

Abbildung 4.9: Richtungsmittelung von G_{SM} mit geschmierten Quellen

reduktion für Übergangsmatrixelemente mit geschmierten Quellen für große Abstände gezeigt. Implizit wurde so die recht gute Rotationssymmetrie der Messungen bestätigt.

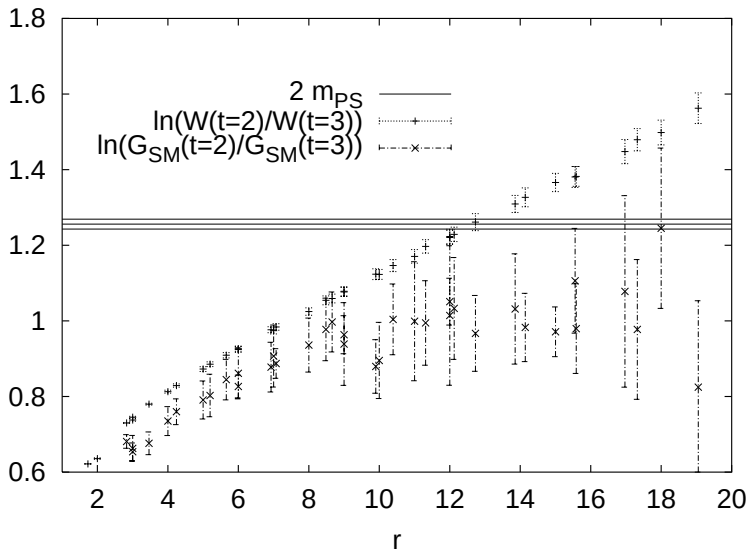

Abbildung 4.10: Eff. Massen von G_{SM} und G_{SS}

Die Abb. 4.4 bis 4.8 stellen bereits in diesem Sinne erzielte Ergebnisse dar. Wiederum ist hier eine Verbesserung des Signals durch Betrachtung aller Punkte auf der Kugelschale mit r oder $|r \pm \delta|$ möglich. Dieser Ansatz wird auf TχL-Gittern in [25] beschrieben.

4.3.3 Ein Test: Effektive Massen

Interessant ist in diesem Zusammenhang, ob die Übergangsoperatoren abstandsabhängig auf beide Grundzustände projizieren. Wir vergleichen in diesem Zusammenhang lokale Massen $ln[G(t)/G(t+1)]$ von Wilson-Loop G_{SS} und Übergangsoperator G_{SM}, wobei wir durch die Qualität unserer Daten auf $t = 2$ beschränkt sind. In der Abb. 4.10 ist dies, um das Massenniveau des asymptotischen 2-Pseudoskalar-Zustands ergänzt, aufgetragen. Die effektiven Massen bestätigen die Erwartungen: Für kleine r ist der statische Quark-Antiquark-Zustand der Grundzustand, die effektive Masse entspricht dem statischen Potential; für große r ist der Grundzustand durch den 2-Meson-Zustand gegeben. Im Überlappbereich läßt sich wegen der Zustandsmischung naturgemäß keine klare Aussage machen.

4.4 4-Quark-Operatoren

4-Quark-Operatoren stellen die eigentliche numerische Herausforderung in der hier betrachteten Mischungsanalyse dar. Während das Loop-Diagramm verhältnismässig einfach durch Rechnung von leichten Propagatoren mit gleichen räumlichen Koordinaten auf den verschiedenen Zeitschichten des Gitters meßbar sein sollte, ist das

eigentliche numerische Problem in der Rechnung des nichtzusammenhängenden, 'disconnected' Meson-Antimeson-Korrelators zu sehen.
Ausgehend von der Berechnung eines leichten Propagators mit Quelle am Aufpunkt (r_0, t_0) ist im Prinzip für jede (r, t)-Kombination die Berechnung eines zusätzlichen leichten Propagators nötig. Diese beiden Propagatoren werden dann mit statischen Quarkpropagatoren zum 2-Meson-Operator kombiniert. Die 4-Quark-Amplitude ergibt sich aus der Differenz dieser beiden Meßwerte. In quenched $SU(2)$-Simulationen [84],[85] wurden diese 'hadronischen Moleküle' für kleine Abstände berechnet.

4.4.1 Ein Versuch mit lokalen Quellen

Diese Berechnung eines festen 'Weges' ist im Vergleich zur Mittelung des Wilsonlooperators über $24^3 \times 40$ Gitterpunkte zu sehen. Insbesondere die für die Übergangsamplituden wegen der relativ billigen $SU(3)$-Multiplikationen mögliche Richtungsmittelung ist hier nicht anwendbar. Es wird also ein deutlich schlechteres Signal bei Verfolgung dieses Ansatzes erwartet.
In einer explorativen Analyse mit leichten Propagatoren auf lokalen Quellen wurden für den 'On-Axis'-Abstand $r = 3$ und $t \leq 3$ auf 183 Konfigurationen Signale für die 4-Quark-Amplitude gemessen. Im Rahmen der Jackknifefehler konnten so jedoch keine signifikanten Signale erzielt werden.

4.4.2 Mögliche Signalverbesserungen

Eine Möglichkeit zur Signalverbesserung ist wiederum die Verwendung von leichten, geschmierten Propagatoren. In Verbindung mit der Richtungsmittelung über zusätzlich zu rechnende leichte Propagatoren mit gleichem Abstand der Quellen könnten so unter Umständen signifikante Signale erzielt werden. Dieses ist offensichtlich mit einem erheblichen numerischen Mehraufwand verbunden.
Alternativen hierzu könnte die Verwendung von Techniken analog zu Volume Source und SET sein, indem z.B. an einem festen Ort auf allen Zeitschichten eine Einheits- bzw. stochastische Quelle gesetzt wird und so T leichte Propagatoren gleichzeitig berechnet werden können. Im hieraus konstruierten Loop-Operator sollten im Mittel über die Konfigurationen die eichvarianten Beiträge leichter Propagatoren zwischen den Zeitschichten unterdrückt werden und nur die erwünschten, eichinvarianten Beiträge der Propagation inerhalb der Zeitschichten überleben. Die Verwendung stochastischer Quellen bietet wiederum die Möglichkeit zur expliziten Unterdrückung unerwünschter Beiträge. Analog dazu ließe sich durch Volumen- oder stochastische Quellen auf einer Zeitschicht ein Näherungswert für den nichtzusammenhängenden Teil des 4-Quark-Korrelators bestimmen. Schließlich verbleibt die Möglichkeit der expliziten Rechnung des Loop-Operators und Abschätzung des Meson-Antimeson-Korrelators für große Abstände durch das Quadrat des Pseudoskalarpropagators.
Von C. Michael [86] wurde eine alternative Monte-Carlo-Integration über stochastische Quellen auf einer Gitterhälfte vorgeschlagen. In [87], [88] und [89] konnten

mit dieser Methode 4-Quark-Operatoren, 2-Static-Light-Mesonen und deren Wechselwirkung berechnet werden. Schließlich konnte so [90] die Kopplung $u(r)$ des Übergangsmatrixelements bestimmt werden.

4.5 Zusammenfassung

In Simulationen der vollen QCD steht die Beobachtung von String-Breaking als wesentlicher Unquenchingeffekt gegenwärtig noch(?) aus. Statt ausschließlich Wilsonloopoperatoren auszuwerten, wurde vorgeschlagen [29], das Brechen des Strings durch eine Mischungsanalyse von statischen Quark-Antiquark- und 4-Quark bzw. 2-Meson-Zuständen im Rahmen einer verallgemeinerten Eigenwertanalyse nachzuweisen. In diesem Zusammenhang wurden in dieser Machbarkeitsstudie folgende Fragestellungen behandelt.

- Bestimmung des Brechungsabstandes r_b bzw. Zustandsmischungsbereichs aus Static-Light-Mesonmassen und mit Wilsonloops bestimmten Potentialen. Auf einem $24^3 \times 40$-TχL-Gitter mit $\kappa = 0.1575$ sollte String-Breaking demnach beobachtbar sein. Die Fehleranalysen für Matrixelemente wurden auf 183 Konfigurationen durchgeführt.
- Mit Standardmethoden auf link-geschmierten Konfigurationen ermittelte Wilsonloopamplituden haben [5] für relevante Abstände und moderate Zeiten einen relativen Fehler im Bereich weniger Prozent.
- Der relative Fehler der Übergangsamplitude läßt sich durch Verwendung geschmierter Quellen und Ausnutzung von Gittersymmetrien deutlich reduzieren. Bei Berechnung lediglich eines leichten Quarkpropagators pro Konfiguration lassen sich im Mischungsbereich z.B. für $t = 2$ relative Fehler unter 5 Prozent erzielen.
- Problematischer stellt sich die Analyse von 4-Quark- bzw. 2-Meson-Operatoren dar. Dieser Operator erfordert im Prinzip die Berechnung von 2 leichten Propagatoren pro Abstand und Zeit. Eine explorative Analyse mit lokalen leichten Quarkporopagatoren lieferte bereits für $r = 3$ kein signifikantes Signal.

[5] Mittelung über lediglich eine Zeitschicht!

Kapitel 5

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden qualitative Aspekte des Vakuums der Gitter-QCD mit dynamischen Wilson-Fermionen untersucht. Die Schwerpunkte lagen hier auf der Messung der η'-Masse und der Betrachtung von Operatoren zur Beobachtung von String-Breaking.
Die Analysen dieser Arbeit wurden auf den Konfigurationen der SESAM/TχL-Kollaborationen mit gluonischer Plaquette- ($\beta = 5.6$) und Wilson-Fermion-Wirkung ($N_f = 2$ leichte Seequarks gleicher Masse) ausgeführt. Diese decken einen m_π/m_ρ-Bereich von 0.57 bis 0.83 mit extrapoliertem inversen Gitterabstand $a^{-1} \approx 2.3GeV$ ab.

Erster Schwerpunkt der Arbeit war die Bestimmung der Masse des Flavor-Singulett-Mesons η'.
Flavor-Singulett-Observable zeigen eine enge Verbindung mit der Struktur des QCD-Vakuums. Zusätzlich zu Diagrammen mit zusammenhängenden Quarklinien tragen nichtzusammenhängende Quarkdiagramme bei, welche Quantenfluktuationen des Vakuums widerspiegeln. Die im Vergleich zum Mesonoktett sehr hohe experimentelle Masse des η' sollte durch einen großen Beitrag des nichtzusammenhängenden, '2-Loop-Korrelators' gegeben sein.
Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit lag auf der numerisch sehr aufwendigen Bestimmung dieses rauschigen Beitrages. Auf einem SESAM-Teilsample wurden Signal-Rausch-Verhältnisse von Schätzmethoden für Quarkloops, Volume-Source und die Verwendung stochastischer Quellen (Stochastic Estimator Technik), verglichen sowie Verbesserungsansätze, insbesondere die Verwendung von eichinvariant geschmierten Quellen und Senken diskutiert. Stochastische Estimation der Quarkloops mit verschmierten Operatoren lieferte Anzeichen für Plateaus in den effektiven η'-Massen, welche als Grundzustandssignale gedeutet wurden. Somit konnten η'-Massen mit Standardmethoden der Analyse des leichten Spektrums, aus direkten Fits der Propagatoren im Bereich des Plateaus der effektiven Masse, ermittelt werden. Die vollständigen Analysen wurden dann mit $O(400)$ lokalen und geschmierten, stochastischen Z_2-Quellen pro Konfiguration durchgeführt. Eine Referenzanalyse auf quenched Konfigurationen wurde anschließend betrachtet. Die auf unseren Samples

ermittelten Massen liegen um $15-25$ Prozent unter den auf $N_f = 2$ extrapolierten 'pseudoexperimentellen' Werten von m_0 und $m_{\eta'}$. Dies kann neben möglichen $O(a)$-Effekten durch die naive Extrapolation der experimentellen Werte in die $N_f = 2$-Welt im Rahmen des Witten-Veneziano-Modells bedingt sein. Anzumerken ist, daß die Verwendung geschmierter Operatoren auf niedrigere η'-Massen als lokale Operatoren führte.
Aus den mit Z_2-Rauschen geschätzten Quarkloops wurden über das Indextheorem topologische Ladungen der einzelnen Konfigurationen ermittelt. Diese wurden mit aus gluonischen Observablen auf gekühlten Konfigurationen bestimmten Werten verglichen. Lineare Regressionen zeigten hier gute Korrelationen.
Der qualitative Zusammenhang zwischen η'-Observablen und Eichfeldtopologie zeigte sich auf Konfigurationsensembles unterschiedlicher topologischer Ladung. Auf Konfigurationen mit höherem Betrag der topologischen Ladung wurden deutlich größere Signale der nichtzusammenhängenden Korrelatoren und damit des η' gemessen. Observable des leichten Hadronspektrums, wie effektive Massen von π, ρ Nukleon und Δ, zeigten diesen Zusammenhang hingegen nicht.

Unter String-Breaking ist das Aufbrechen eines statischen Quark-Antiquark-Paares endlicher Ausdehnung in einen energetisch günstigeren 4-Quark-Zustand durch Effekte leichter Seequarkpaare zu verstehen. Zweiter Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit war die Betrachtung von Operatoren zur Beobachtung diesen qualitativen Unterschieds zwischen voller QCD und Valenzquark-Näherung und die Verbesserung der Signalqualität.
Hier wurde der Ansatz verfolgt, dieses Phänomen durch eine Mischungsanalyse von statischem Quark-Antiquark-Paar und 4-Quark-Zustand nachzuweisen. Relevante Operatoren sind der Wilsonloop als Korrelator des Quark-Antiquark-Zustands, die Übergangsamplitude zwischen String- und 4-Quark-Zustand sowie der Korrelator des 4-Quark-Zustands.
Zuerst wurde der Brechungsabstand bzw. Zustandsmischungsbereich r_b aus Static-Light-Mesonmassen und Wilsonloop-Potentialen bestimmt. Auf einem TχL-Gitter mit dem Hopping-Parameter $\kappa = 0.1575$ sollte String-Breaking demnach beobachtbar sein. Mit Standardmethoden auf link-geschmierten Konfigurationen ermittelte Amplituden von Wilsonloops haben für relevante Abstände und moderate Zeiten bei Mittelung über lediglich eine Zeitschicht bereits einen relativen Fehler im Bereich unter 2 Prozent. Die Bestimmung der Übergangsamplitude erfordert die numerisch aufwendige Rechnung von leichten Quarkpropagatoren auf jeder Konfiguration. Der relative Fehler dieses Signals ließ sich durch die Verwendung geschmierter Quellen und Ausnutzung von Gittersymmetrien deutlich reduzieren. Bei Berechnung lediglich eines leichten Quarkpropagators pro Konfiguration ließen sich für $r \approx r_b$ z.B. für den Zeitabstand $t = 2$ relative Fehler unter 5 Prozent erzielen. Die Bestimmung des 4-Quark-Korrelators erfordert die Rechnung zusätzlicher leichter Quarkpropagatoren. Eine erste, explorative Analyse mit lokalen leichten Quarkpropagatoren lieferte kein signifikantes Signal. Die Verwendung geschmierter und/oder stochastischer Quellen könnte hier auf entscheidende Verbesserungen führen und wird zur Zeit untersucht.

Anhang A

γ-Konventionen

γ-Matrizen im Minkowsi-Raum mit der Metrik

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{A.0.1}$$

müssen die Antivertauschungsrelation

$$\{\gamma^\mu \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \tag{A.0.2}$$

erfüllen. Als Chiralitätsoperator läßt sich weiterhin

$$\gamma^5 = \gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \tag{A.0.3}$$

definieren. Wählt man die Dirac-Darstellung der γ-Matrizen so erhält man nach Wick-Rotation folgende Darstellung der euklidischen γ-Matrizen

$$\gamma_4^E = \gamma_D^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{A.0.4}$$

$$\vec{\gamma}^E = -i\vec{\gamma}_D = \begin{pmatrix} 0 & -i\vec{\sigma} \\ i\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{A.0.5}$$

und

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ . \tag{A.0.6}$$

Diese Matrizen erfüllen offensichtlich die Antivertauschungsrelation im Euklidischen

$$\{\gamma^\mu \gamma^\nu\} = 2\delta^{\mu\nu} \ , \ \mu, \nu \in \{1, 2, 3, 4, 5\} \ . \tag{A.0.7}$$

Die auftretenden Pauli-Matrizen

$$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \tag{A.0.8}$$

sind hier wie üblich definiert als

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ . \tag{A.0.9}$$

Anhang B

Simulationsparameter

In Tabelle B sind die Parameter der SESAM/TχL-HMC-Simulationen angegeben. Dies sind der die Seequarkmasse festlegende Hopping-Parameter κ, das jeweilige

Tabelle B.1: Simulationsparameter

κ	m_π/m_ρ	$L^3 \times T$	n_{md}	N_{traj}	N_{conf}
$nf = 2$	$\beta = 5.6$				
0.1560	0.833(5)	$16^3 \times 32$	100 ± 20	5800	200
0.1565	0.809(12)	$16^3 \times 32$	100 ± 20	6000	200
0.1570	0.757(11)	$16^3 \times 32$	100 ± 20	6000	200
0.1575	0.686(11)	$16^3 \times 32$	100 ± 20	6500	200
0.1575	0.704(5)	$24^3 \times 40$	100 ± 20	5000	180
0.1580	0.574(12)	$24^3 \times 40$	100 ± 20	4500	160

Massenverhältnis von Pseudoskalar- und Vektor-Meson m_π/m_ρ, die Gittergröße in Gittereinheiten $L^3 \times T$, die Anzahl der Molekulardynamikschritte n_{md}, die Anzahl der Trajektorien N_{traj} auf der jeweiligen Seequarkmasse und die Anzahl der verwendeten Konfigurationen N_{conf}. Aus den Extrapolationen in [15] wurden die Werte des kritischen und leichten Hopping-Parameters

$$\kappa_{crit} = 0.158507(44) \text{ , } \kappa_{light} = 0.158462(42) \tag{B.0.1}$$

übernommen. Diese entsprechen verschwindender Seequarkmasse sowie der Seequarkmasse beim experimentellen m_π/m_ρ-Verhältnis. Aus der Extrapolation des ρ zur leichten Seequarkmasse ergab sich ein extrapolierter inverser Gitterabstand von $a^{-1} = 2.30(6) GeV$.
Eine kombinierte Analyse der SESAM- und TχL-Daten ist noch nicht verfügbar. Die Ergebnisse der m_π^2-Extrapolationen in Kapitel 3 deuten jedoch zumindest auf eine gute Verträglichkeit der Daten mit dem verwendeten κ_{crit} hin.

Anhang C

Jackknife-Fehlerabschätzung

Im folgenden wird die in dieser Arbeit verwendete Fehlerabschätzung von Observablen auf möglicherweise korrelierten Konfigurationen mittels des sogenannten Jackknifeverfahrens dargestellt.

C.1 Naive Fehlerbetrachtung

Bei Messung des Operators $\mathcal{O}$ auf N_{conf} Konfigurationen erhält man den Operatorerwartungswert $\langle\mathcal{O}\rangle$ als naiven Mittelwert:

$$\langle\mathcal{O}\rangle \equiv \bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N_{conf}} \sum_{i=1}^{N_{conf}} \mathcal{O}_i \ . \tag{C.1.1}$$

Setzt man Unkorreliertheit der einzelnen Messungen voraus, so ergibt sich mit der Schätzung der Varianz

$$\sigma^2 = \frac{N}{N-1}(\langle\mathcal{O}^2\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle^2) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N_{conf}} (\mathcal{O}_i - \bar{\mathcal{O}})^2 \tag{C.1.2}$$

schließlich der naive Fehler des Mittelwertes

$$\delta_{\bar{\mathcal{O}}} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N_{conf}} (\mathcal{O}_i - \bar{\mathcal{O}})^2} \ . \tag{C.1.3}$$

C.2 Der Jackknife-Fehler

Die Analyse korrelierter Daten erfordert im Prinzip die Berechnung der Inversen der Varianz-Kovarianz-Matrix $\Omega_{xy} = \langle(x-\bar{x})(y-\bar{y})\rangle$. Eine Inversion dieser Matrix wird im Allgemeinen wegen der sehr rauschigen Kovarianzen recht unzuverlässig sein.

Eine Umgehung dieser Problematik bietet die Analyse von Subsamples der vollen Statistik mit N Konfigurationen $S = \{s_1, s_2, ..., s_N\}$.
Man bildet N_b Observable $\hat{\mathcal{O}}_k$ durch Messung auf N_b Subsamples S_k, indem man aus dem Gesamtsample jeweils Blöcke der Größe $j = N/N_b$ entfernt.

$$S_k = \{s_1, .., s_{j*(k-1)}, s_{j*k+1}, .., s_N\} \tag{C.2.1}$$

Der Fehler des Mittelwertes δ_J kann dann mit dem Mittelwert auf den Subsamples

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N_b} \sum_{k=1}^{N_b} \hat{\mathcal{O}}_k \tag{C.2.2}$$

für geeignet großes j [1] durch

$$\delta_J^2 = (N_b - 1)(< \hat{\mathcal{O}}^2 > - < \hat{\mathcal{O}} >^2) \equiv \frac{N_b - 1}{N_b} \sum_{k=1}^{N_b} (\hat{\mathcal{O}}_k - \bar{\mathcal{O}})^2 \tag{C.2.3}$$

geschätzt werden. Alle in dieser Arbeit angegebenen Fehler der Observablen sind auf diese Weise ermittelt worden.

[1] Im Allgemeinen zeigt sich erst ab einer Blockgröße j_{min} ein Plateau des Fehlers

Literaturverzeichnis

[1] S. Weinberg, Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 1264; A. Salam, J. Ward, Phys.Lett. 13 (1964) 168; A. Salam in Elementary Particle Physics (Nobel Symposium No. 8) N. vartholm (Ed.), Stockholm 1968.

[2] H. Fritzsch , M. Gell-Mann, H. Leutwyler, Phys. Lett B47 (1973) 365.

[3] G. tHooft, Nucl. Phys. B33 (1971) 173; Nucl. Phys. B35 (1971) 167.

[4] C. Callan, Phys. Rev. D2 (1970) 1541; K. Symanzik, Comm. Math. Phys. 18 (1970) 227.

[5] D. Gross F. Wilczek, Phys. Rev. D8 (1973) 3633; H.D. Politzer, Phys. Rev. Lett. 30 (1973) 1346.

[6] K.G. Wilson, Phys.Rev. D10 (1974) 2445.

[7] K. Symanzik, Nucl. Phys. B226 (1983) 187.

[8] K. Wilson, J. Kogut, Phys. Rep. C12 (1974) 75; K. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 773.

[9] P. Hasenfratz, F. Niedermayer, Nucl. Phys. B414 (1994) 785.

[10] CP-PACS-Kollaboration: S. Aoki, G. Boyd, R. Burkhalter, S. Ejiri, M. Fukugita, S. Hashimoto, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, K. Nagai, M. Okawa, H. P. Shanahan, A. Ukawa, T. Yoshie, Phys.Rev.Lett. 84 (2000) 238.

[11] SESAM-Collaboration: U. Glässner, S. Güsken, H. Hoeber, Th. Lippert, X. Luo, G. Ritzenhöfer K. Schilling, G. Siegert, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 47 (1996) 386.

[12] TχL-Collaboration: L. Conti, N. Eicker, L. Giusti, U. Glässner, S. Güsken, H. Hoeber, Th. Lippert, G. Martinelli, F. Rapuano, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, G. Siegert, A. Spitz, J. Viehoff, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 53 (1997) 222.

[13] UKQCD-Kollaboration: C. R. Allton, S. P. Booth, K. C. Bowler, M. Foster, J. Garden, A. C. Irving, R. D. Kenway, C. Michael, J. Peisa, S. M. Pickles, J. C. Sexton, Z. Sroczynski, M. Talevi, H. Wittig, Phys.Rev. D60 (1999) 034507.

[14] CPPACS-Kollaboration: S. Aoki, G. Boyd, R. Burkhalter, S. Hashimoto, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, T. Yoshie, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 60 (1998) 335.

[15] N. Eicker, U. Glässner, S. Güsken, H. Höber, P. Lacock, Th. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, Th. Struckmann, P. Überholz, J. Viehoff, Phys. Rev. D59 (1999) 014509.

[16] S. Güsken, P. Ueberholz, J. Viehoff, N. Eicker, P. Lacock, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, Th. Struckmann, Phys. Rev. D59 (1999) 054504.

[17] S. Güsken, P. Ueberholz, J. Viehoff, N. Eicker, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, Phys. Rev. D59 (1999) 114502.

[18] Y. Kuramashi, M. Fukugita, H. Mino, M. Okawa, A. Ukawa, Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 3448.

[19] G. Kilcup, J. Grandy, L. Venkataraman, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 47 (1996) 358; L. Venkataraman, G. Kilcup, J. Grandy, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 53 (1997) 259; L. Venkataraman, G. Kilcup, hep-lat/9711006.

[20] CP-PACS Collaboration: A. Ali Khan, S. Aoki, R. Burkhalter, S. Ejiri, M. Fukugita, S. Hashimoto, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, T. Manke, K. Nagai, M. Okawa, H. P. Shanahan, A. Ukawa, T. Yoshie, hep-lat/9909045.

[21] C. Michael, M. S. Foster, C. McNeile, hep-lat/9909036.

[22] G.S. Bali, K. Schilling, Phys. Rev. D47 (1993) 661.

[23] S.P. Booth, D.S. Henty, A. Hulsebos, A.C. Irving, C. Michael, P.W. Stephenson, Phys.Lett. B294 (1992) 385.

[24] U. Glässsner, S. Güsken, H. Höber, Th. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, G. Siegert, A. Spitz, A. Wachter, Phys.Lett. B383 (1996) 98.

[25] Bram Bolder, Thorsten Struckmann, Gunnar Bali, Norbert Eicker, Thomas Lippert, Boris Orth, Klaus Schilling, Peer Überholz, in Vorbereitung.

[26] M. Talevi für die UKQCD-Kollaboration, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 63 (1998) 227.

[27] CP-PACS-Kollaboration: S. Aoki, G. Boyd, R. Burkhalter, S. Hashimoto, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, T. Yoshie, Phys. Rev. D60 (1999) 114508.

[28] S. Güsken, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 63 (1998) 209.

[29] I.T Drummond, Phys. Lett. B442 (1998) 279; Nucl. Phys. Proc. Suppl. 73 (1999) 596; Phys. Lett. B434 (1998) 92.

[30] F. Knechtli, R. Sommer, Phys. Lett. B440(1998)345; F. Knechtli, 'The Static Potential in the SU(2) Higgs Model', Dissertation Humboldt-Univ. Berlin 1999, hep-lat/9910044.

[31] O. Philipsen, H. Wittig, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 4056.

[32] K. Schilling, hep-lat/9909152.

[33] H.J. Rothe, 'Lattice Gauge Theory – An Introduction', World Scientific Publishing, Singapore, 1992.

[34] I. Montvay, G. Münster, 'Quantum Fields on a Lattice', Cambridge University Press, Cambridge, 1994.

[35] R. Gupta, hep-lat/9807028.

[36] R.P. Feynman, A.R. Hibbs, 'Quantum Mechanics and Pathintegrals', McGraw Hill Book Company, 1965.

[37] G. Roepsdorff, 'Pfadintegrale in der Quantenphysik' Vieweg Verlag, Braunschweig, 1991.

[38] J. Kogut, L Susskind, Phys. Rev. D11 (1975) 395.

[39] K. Wilson, Erice School of Phusics, Erice 1975.

[40] H. Nielsen, M. Ninomiya, Nucl. Phys. B185 (1981) 20.

[41] S. Duane, A.D. Kennedy, B.J. Pendleton, D. Roweth, Phys.Lett. B195 (1975) 216.

[42] B. Alles, G. Bali, M. D'Elia, A. Di Giacomo, N. Eicker, S. Guesken, H. Hoeber, Th. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, P. Ueberholz, J. Viehoff, Phys.Rev. D58 (1998) 071503; Th. Lippert, B. Alles, G. Bali, M. D'Elia, A. Di Giacomo, N. Eicker, S. Guesken, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, P. Ueberholz, J. Viehoff, Nucl.Phys.Proc.Suppl. 73 (1999) 521.

[43] S. Weinberg, Phys. Rev. D11 (1975) 3583.

[44] A.A. Belavin, A.M. Polyakov, A.S. Schwartz, Yu.S. Tyupkin, Phys. Lett. 59B (1975) 85.

[45] G. t'Hooft, Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 8; G. t'Hooft, Phys. Rev. D14 (1976) 3432.

[46] R. Jackiw, C. Rebbi, Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 172.

[47] C.G. Callan, R.F. Dashen, D.J. Gross, Phys. Lett. 63B (1976) 334.

[48] J.S. Bell, R. Jackiw, Nuovo Cimento 60A (1969) 47; S.L. Adler Phys. Rev. 117, (1969) 2426.

[49] E. Witten, Nucl. Phys. B156 (1979) 269.

[50] G. Veneziano, Nucl. Phys. B159 (1979) 213.

[51] M. Atiyah, I.M. Singer, Ann. Math. 87 (1968) 484; M. Atiyah, I.M. Singer, Ann. Math. 93 (1971) 139.

[52] J. Smit, J. C. Vink, Nucl. Phys. B286 (1987) 485; J. Smit, J. C. Vink, Phys. Lett. B194 (1987) 433; J. Vink, Phys. Lett. B212 (1988) 483.

[53] S. Itoh, Y. Iwasaki, T. Yoshie, Phys. Rev. D36 (1987) 527.

[54] Hartmut Neff, private Mitteilung.

[55] C. Bernard, M. Golterman, Phys. Rev. D49 (1994) 486; M. Golterman, K. C. Leung, Phys. Rev. D57 (1998) 5703.

[56] T. Feldmann, P. Kroll, B. Stech, Phys. Rev. D58 (1998) 114006; T. Feldmann, Int. J. Mod. Phys. A15 (2000) 159.

[57] W. Wilcox, B. Lindsay, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 63 (1998) 973.

[58] K. Bitar, A.D. Kennedy, R. Horsley, S. Meyer, P. Rossi, Nucl. Phys. B313 (1989) 348.

[59] S.J. Dong, K.F. Liu, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 26 (1992) 353; S.J. Dong, K.F. Liu, Phys. Lett. B328 (1994) 130.

[60] J. Viehoff, N. Eicker, S. Güsken, H. Höber, P. Lacock, Th. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, A. Spitz, P. Überholz, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 63 (1998) 269.

[61] N. Eicker, U. Glässner, S. Güsken H. Höber, Th. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, G. Siegert A. Spitz, P. Überholz, J. Viehoff, Phys. Lett. B389 (1996) 720.

[62] J. Viehoff, S. Güsken, P. Überholz, N. Eicker, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, hep-lat/9910001.

[63] G. Ritzenhöfer, Flavour singlet operators: A first calculation of quark-loop insertions in full QCD, WUB-DIS 96-12 Dissertation, Wuppertal, 1997.

[64] S. Güsken, 'Flavor singlet phenomena in lattice QCD', Habilitationsschrift, hep-lat/9906034.

[65] J. Viehoff, Die Bestimmung von disconnected Diagrammen in flavor-singlet Matrixelementen der vollen QCD, WUB-DIS 99-17 Dissertation, Wuppertal, 1999.

[66] S. Güsken, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 17 (1990) 361.

[67] C. Thron, S. J. Dong, K. F. Liu, H. P. Ying, Phys.Rev. D57 (1998) 1642.

[68] W. Wilcox, hep-lat/9908001; W. Wilcox, hep-lat/9911013.

[69] B. Allés, M. D'Elia, A. Di Giacomo, R. Kirchner, Phys.Rev. D58 (1998) 114506.

[70] B. Berg, Phys. Lett. B104 (1981) 475; M. Teper, Phys. Lett. B162 (1985) 157.

[71] I.-O. Stamatescu, hep-lat/0002005; Margarita Garcia Perez, Owe Philipsen, Ion Olimpiu Stamatescu, Nucl.Phys. B551 (1999) 293.

[72] A. Hart, M. Teper, hep-ph/0004180.

[73] M. Fukugita, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, Phys. Rev. D51 (1995) 3952.

[74] T. Schaefer, E. Shuryak, Rev. Mod. Phys. 70 (1998) 323.

[75] H.D. Trottier, Phys. Rev. D60 (1999) 034506.

[76] C. DeTar, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Phys. Rev. D59 (1999) 031501.

[77] F. Gliozzi, P. Provero, Nucl. Phys. B556 (1999) 76.

[78] O. Philipsen, H. Wittig, Phys. Lett. B451 (1999) 146.

[79] P. Stephenson, Nucl. Phys. B550 (1999) 427.

[80] M. Lüscher, U. Wolff, Nucl. Phys. B339 (1990) 222.

[81] APE-Kollaboration: M. Albanese et al., Phys.Lett. B192 (1987) 163.

[82] I.T Drummond, Phys. Lett, B447 (1999) 298.

[83] Gunnar S. Bali, Bram Bolder, Norbert Eicker, Thomas Lippert, Boris Orth, Peer Überholz, Klaus Schilling, Thorsten Struckmann, hep-lat/0003012.

[84] C. Stewart, R. Koniuk, Phys. Rev. D57 (1998) 5581.

[85] C. Stewart, R. Koniuk, Phys. Rev. D59 (1999) 114503.

[86] C. Michael, J. Peisa, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 60 (1998) 55.

[87] P. Pennanen, A. M. Green, C. Michael, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 73 (1999) 351.

[88] C. Michael, P. Pennanen, Phys. Rev. D60 (1999) 054012.

[89] P. Pennanen, C. Michael, A. M. Green, hep-lat/9908032.

[90] C. Michael, P. Pennanen, hep-lat/001015.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Klaus Schilling danken. Als Initiator der Arbeit brachte er mir dieses interessante Thema näher. Seine Diskussionsbereitschaft und Ideen begleiteten und erleichterten die Durchführung dieses Projektes.

Hervorzuheben ist der Beitrag von Dr. Stephan Güsken, der durch seine Vorschläge und kritische Kommentare wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beitrug. Auch Dr. Jochen Viehoff ist für die große Hilfe bei der praktischen Umsetzung des Projektes in diesem Atemzuge zu nennen.

Dr. Peer Überholz danke ich für die große Unterstützung in der Schlußphase des Projektes.

Weiterhin gilt mein Dank allen Mitgliedern der SESAM/TχL-Kollaboration für die Unterstützung und Diskussionsbereitschaft sowie den stets hilfsbereiten Damen in den Sekretariaten der Wuppertaler Theorie und des NIC Jülich.

Dr. Gunnar Bali danke ich für die Überlassung von Routinen im Zusammmenhang mit der Analyse der String-Breaking-Signale.

Für die finanzielle Unterstützung meiner Promotion und der damit verbundenen Aktivitäten danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem John von Neumann-Institut für Computing.

Die vorzügliche Rechnerbetreuung der Quadrics-Maschinen am NIC Zeuthen und an der Universität Bielefeld sowie der T3E am NIC Jülich und von ALiCE an der Universität Wuppertal ermöglichte die Durchführung der umfangreichen Rechnungen.

Mein besonderer Dank gilt der Besatzung von F 10.09, Carsten Merten, Marcus Richter, Armin Seyfried und Jochen Viehoff für die außerordentlich gute Arbeitsatmosphäre und intensive Diskussionen auch abseits der Physik.

Meiner Familie und meiner Freundin Anke Brasgalla möchte ich an dieser Stelle für den Rückhalt und die große Unterstützung in allen Belangen zu allen Zeiten danken.

Thorsten Struckmann

Wuppertal, Juni 2000