

Untersuchung der Struktur des QCD-Vakuums mit Hilfe von Overlap-Fermionen

Volker Weinberg
Dezember 2007



Im Fachbereich Physik
der Freien Universität Berlin
eingereichte Dissertation

Erster Gutachter: Prof. Dr. Volkard Linke
Zweiter Gutachter: Prof. Dr. Gerrit Schierholz
Tag der Disputation: 13. Februar 2008

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	9
1 Grundlagen	17
1.1 QCD im Kontinuum	17
1.2 Chirale Symmetrie	23
1.3 Diskretisierung des euklidischen Raumes	29
1.4 Monte-Carlo-Simulationen auf dem Gitter	40
2 Modelle zur Beschreibung des QCD-Vakuums	43
2.1 Semiklassische Modelle	43
2.2 Niedrigdimensionale Vakuumdefekte	47
2.3 Parallelen zum Anderson-Modell	48
3 Simulationsdetails und Analysewerkzeuge	49
3.1 Simulationsparameter	49
3.2 Implementierung der Signumsfunktion	50
3.3 Konditionierung des Wilson-Operators	51
3.4 Lokalität des Overlap-Operators	53
3.5 Bestimmung der physikalischen Skala	56

3.6	Analysewerkzeuge	60
4	Verteilung der Eigenmoden	67
4.1	Spektrale Eigenschaften von Overlap-Fermionen	67
4.2	Spektrale Dichte der Eigenmoden im Kontext der chiralen Zufallsmatrixtheorie	72
5	Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden	77
5.1	Das inverse Partizipationsverhältnis der Eigenmoden	79
5.2	Multifraktalität der Eigenmoden	82
5.3	Clusteranalyse der Eigenmoden	84
6	Chirale Eigenschaften der Eigenmoden	91
7	Die topologische Ladungsdichte	97
7.1	Die topologische Ladung	97
7.2	Die topologische Ladungsdichte	108
7.3	Clusteranalyse der topologischen Dichte	115
7.4	Der topologische Ladungskorrelator	129
7.5	Korrelation der lokalen Chiralität und der trunkierten topo- logischen Dichte	132
8	Der gefilterte gluonische Feldstärketensor	135
8.1	Darstellung des Feldstärketensors	135
8.2	Die lokale Selbstdualität der Eichfelder	137
8.3	Clusteranalyse der Bereiche hoher Selbstdualität	143
9	Saturierung hadronischer Korrelationsfunktionen	147

9.1	Grundlagen	147
9.2	Korrelationsfunktionen des Pions und des ρ -Mesons.	150
9.3	Effektive Massen des Pions und des ρ -Mesons	154
9.4	Die PCAC-Quarkmasse	156
10	Der Phasenübergang der QCD bei endlicher Temperatur	159
10.1	QCD bei endlicher Temperatur	159
10.2	Die Ordnung des Phasenübergangs	163
10.3	Die kritische Temperatur des Übergangs	167
10.4	Simulationen der DIK-Kollaboration	169
10.5	Parameter der Simulationen mit Valenz-Overlap-Fermionen	175
10.6	Das chirale Kondensat und seine Suszeptibilität	179
10.7	Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden	186
10.8	Chirale Eigenschaften der Eigenmoden	187
10.9	Topologische Eigenschaften in der Umgebung des Übergangs	187
10.10	Die lokale Selbstdualität in der Umgebung des Übergangs . .	196
	Zusammenfassung	201
	A Tabelle der Dimensionen	205
	B Konventionen	207
	Eigene Veröffentlichungen	209
	Literaturverzeichnis	211
	Danksagung	229

Einleitung

色即是空 空即是色

Struktur ist nichts als Leere –
Leere nichts anderes als Struktur
(Herz-Sutra)

Theoretische Elementarteilchenphysik wird primär von dem Streben nach einer einheitlichen Beschreibung der subnuklearen Realität geleitet. Im Standardmodell der Elementarteilchenphysik, das durch die Symmetriegruppe $SU(3)_c \times SU(2)_w \times U(1)_Y$ charakterisiert wird, können bis auf die Gravitation alle uns bekannten fundamentalen Wechselwirkungen durch Quantenfeldtheorien beschrieben werden, die invariant unter lokalen Eichtransformationen sind. Im Glashow-Salam-Weinberg-Modell [1, 2, 3, 4] wurde die schwache Kernkraft und die elektromagnetische Wechselwirkung vereinheitlicht. Die Symmetriegruppe $SU(2)_w \times U(1)_Y$ dieses Modells ist jedoch in der Natur spontan in die $U(1)$ -Symmetrie der Quantenelektrodynamik (QED) gebrochen.

Die unter lokalen Eichtransformationen der Symmetriegruppe $SU(3)_c$ invariante Quantenchromodynamik (QCD) [5, 6] stieß zwar nach ihrer Formulierung im Jahr 1973 auf große Skepsis, sie wird jedoch heute allgemein als grundlegende Eichtheorie der starken Wechselwirkung anerkannt. Da die adjungierte Darstellung der Gruppe $SU(3)_c$ die Dimension $N^2 - 1 = 8$ besitzt, treten acht Eichbosonen – die Gluonen – auf, die im Gegensatz zu dem Eichboson abelscher Eichtheorien, etwa dem Photon der QED, selbst eine durch drei mögliche Werte charakterisierte Farbladung tragen und damit Gluon-Selbstkopplungen ermöglichen. Diese Eichbosonen vermitteln die Wechselwirkung zwischen den ebenso eine Farbladung tragenden fermionischen Feldern der Theorie, die Quarks genannt werden.

Die QCD zeichnet sich besonders durch das Phänomen der asymptotischen Freiheit und des sog. Confinements der Quarks aus. Die Ende der 60er Jahre beobachtete Skaleninvarianz [7] in tief inelastischen Lepton-Nukleon-Streuexperimenten deutete erstmals an, daß Hadronen aus fundamentaleren Objekten konstituiert sind, die zunächst als Partonen [8] bezeichnet wurden und später mit den Quarks der QCD identifiziert wurden. Die Skaleninvarianz

bei hohen Energien und Impulsüberträgen führte zu der Einsicht, daß die starke Wechselwirkung für kleine Abstände abnimmt und durch eine Theorie beschrieben werden muß, in der die fermionischen Konstituenten asymptotisch frei sind. Die Erkenntnis, daß nichtabelsche Yang-Mills-Theorien [9] das Phänomen der asymptotischen Freiheit erklären können [10] und renormierbar sind [11, 12] ebnete den Weg zur Formulierung der QCD. Bei hohen Energien und kleinen Abständen erlaubt die asymptotische Freiheit eine perturbative Formulierung der starken Wechselwirkung.

Die bereits in dem 1964 durch Gell-Mann [13] und Zweig [14] formulierten Quarkmodell postulierten fermionischen Konstituenten der Hadronen konnten jedoch experimentell nie isoliert beobachtet werden. Dies führte zu der Hypothese, daß Quarks – zumindest bei nicht extrem hohen Temperaturen – nur in gebundenen Zuständen, jedoch niemals frei auftreten können. Dieser Einschuß der Quarks wird als Confinement bezeichnet und in der QCD durch eine mit dem Abstand der Quarks stark zunehmende Kopplungskonstante implementiert. Damit werden perturbative Rechnungen im Bereich niedriger Energien und großer Distanzen unmöglich. Zur Beschreibung nichtperturbativer Phänomene wie des Confinements der Quarks wurde durch Wilson [15] 1974 die Gittereichtheorie eingeführt. Zum einen wird dadurch die nicht-perturbative Berechnung hadronischer Größen wie etwa der Hadronen- und Quarkmassen ermöglicht, zum anderen kann jedoch auch die reiche Struktur des QCD-Vakuums, die als verantwortlich für das Confinement angesehen wird, untersucht werden. Trotz großer theoretischer und numerischer Anstrengungen ist das Verständnis der QCD jedoch bruchstückhaft geblieben. Es wurden zwar verschiedene Modelle des Confinements der Quarks vorgeschlagen, der genaue Mechanismus bleibt jedoch unverstanden.

Ein anderes Phänomen der starken Wechselwirkung, dessen Mechanismus ebenso noch nicht befriedigend erklärt werden konnte, ist die Brechung der chiralen Symmetrie. Im sog. chiralen Limes, d.h. bei verschwindenden Quarkmassen, ist die Lagrange-Dichte der QCD invariant unter globalen chiralen Transformationen $U(N_f)_- \otimes U(N_f)_+$, wobei N_f die Anzahl der Flavour-Freiheitsgrade der Quarks bezeichnet. Im Standardmodell der Elementarteilchenphysik geht man davon aus, daß Quarks in sechs verschiedenen Gattungen, den sog. Flavours u, d, s, c, b, t auftreten. Die sechs Flavours lassen sich in das Paar des leichten u- (mit einer Stromquarkmasse von etwa 1.5–3.0 MeV) und d-Quarks (3–7 MeV), das mittelschwere s-Quark (95 ± 25 MeV) und die wesentlich schwereren s-, b- und t-Quarks (> 1 GeV) kategorisieren [16]. Für $N_f = 2$ Flavours wird die chirale Invarianz der Lagrange-Dichte daher nur gering explizit verletzt, so daß diese Symmetrie von großer Bedeutung

für die Phänomenologie leichter Hadronen ist. In der Natur wird die chirale Symmetrie jedoch auch spontan durch die Bildung eines nichtverschwindenden chiralen Kondensats gebrochen. Während die Lagrange-Dichte der QCD invariant bleibt, wird die Symmetrie durch das Vakuum nicht respektiert. Der Mechanismus dieser spontanen Brechung der chiralen Symmetrie bleibt unverstanden. Semiklassische Modelle liefern mögliche Szenarien der spontanen Symmetriebrechung, eine modellunabhängige Untersuchung auf dem Gitter wurde jedoch in der Vergangenheit stets dadurch erschwert, daß keine die chirale Symmetrie nicht explizit brechende Diskretisierung des Dirac-Operators bekannt war.

Erst die Wiederentdeckung [17] der Ginsparg-Wilson-Gleichung [18] im Jahr 1997 führte zu Formulierungen der Gittereichtheorie, die die chirale Symmetrie respektieren. Die in dieser Arbeit verwendeten Overlap-Fermionen [19, 20] implementieren die chirale Symmetrie auf dem Gitter und realisieren ferner das Atiyah-Singer-Index-Theorem, das die chiralen Nullmoden des Overlap-Operators mit der topologischen Ladung der zugrunde liegenden Eichfelder verbindet. Während sich in der Vergangenheit die Betrachtung der Vakuumstruktur meist auf Aspekte beschränkte, die mit dem Confinement der Quarks in Verbindung stehen, sind Overlap-Fermionen besonders prädestiniert, chirale und topologische Eigenschaften, die in Verbindung mit der spontanen Brechung der chiralen Symmetrie stehen zu untersuchen.

Motiviert durch Prognosen phänomenologischer Instanton-Modelle, den Aussagen der sog. Banks-Casher-Relation [21] und der Tatsache, daß die Eigenmoden in der Spektraldarstellung des Quarkpropagators invers eingehen, vermutet man, daß die physikalisch relevanten Informationen vor allem nahe des chiralen Limes in nur wenigen niedrig liegenden Eigenmoden des Dirac-Operators enthalten sind. Da die spektralen Eigenschaften der Moden des Overlap-Operators in vielerlei Hinsicht den Eigenschaften der Eigenmoden des Dirac-Operators im Kontinuum gleichen, sind die Moden des Overlap-Operators besonders zur spektralen Entwicklung diverser Größen geeignet. Ein Trunkieren dieser Entwicklung agiert als UV-Filter und ermöglicht eine Separation der physikalisch relevanten nichtperturbativen Freiheitsgrade des QCD-Vakuums von unphysikalischen durch die Diskretisierung der Raumzeit bedingten Fluktuationen.

Theorien zur Beschreibung des frühen Universums und von Neutronensternen, sowie experimentelle Untersuchungen mit schweren Ionen am GSI, CERN und mit dem Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) am BNL lassen vermuten, daß bei extrem hohen Temperaturen die Materie einen Phasentübergang

zu einem Quark-Gluon-Plasma durchläuft. In dieser Hochtemperatur-Phase erwartet man, daß sowohl das Confinement aufgehoben ist, als auch die chirale Symmetrie restauriert ist. Zur Untersuchung des Wandels der chiralen und topologischen Struktur in der Umgebung dieses Übergangs sind Overlap-Fermionen ebenso bestens geeignet.

Im Rahmen dieser Arbeit werden unter Verwendung von Overlap-Fermionen verschiedene spektrale und chirale Eigenschaften der niedrigen Moden beschrieben, sowie die topologische und selbstduale Struktur der zugrunde liegenden Eichfelder charakterisiert. Während zunächst die Struktur des QCD-Vakuums bei verschwindender Temperatur $T = 0$ in der Valenzquark-Approximation untersucht wird, weitet das letzte Kapitel die Analyse auf dynamische Konfigurationen bei endlicher Temperatur aus, um einem Verständnis des chiralen Phasenübergangs der QCD näherzukommen.

In Kapitel 1 werden die wesentlichen theoretischen Grundlagen zusammengefaßt. Einen Schwerpunkt bildet die chirale Symmetrie der starken Wechselwirkung und ihre Implementierung auf dem Gitter. Beginnend mit der Formulierung der QCD im Minkowski-Raum gehen wir zur euklidischen Formulierung über. Die Diskretisierung des euklidischen Raumes bietet eine Regularisierung der Theorie und eröffnet den Weg zu numerischen Simulationen auf dem Gitter. Erläutert werden zunächst die im Rahmen der Simulationen bei endlicher Temperatur verwendete Wilson-Eichfeldwirkung, sowie die bei unseren Simulationen bei $T = 0$ eingesetzte verbesserte Lüscher-Weisz-Eichfeldwirkung. Im Anschluß werden Wilson-Fermionen, die $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Wilson/Clover-Fermionen, sowie Overlap-Fermionen diskutiert. Das Kapitel endet mit einer Beschreibung der bei $T = 0$ verwendeten Valenzquark-Approximation, in der die Beiträge dynamischer Quarks vernachlässigt werden.

Kapitel 2 faßt unterschiedliche Modelle zur Beschreibung des QCD-Vakuums zusammen. Instanton-Modelle basieren auf Lösungen der klassischen Feldgleichungen und treten im euklidischen Raum als in vier Dimensionen stark lokalisierte (anti-)selbstduale Felder in Erscheinung. Im Feld eines selbstdualen Instantons mit topologischer Ladung $Q = 1$ besitzt der Dirac-Operator eine Nullmode negativer Chiralität. Dies motiviert die an verschiedenen Stellen dieser Arbeit betrachtete Korrelation zwischen Lokalisierungs- und Chiralitätseigenschaften der Moden, der topologischen Ladungsdichte sowie Bereichen starker (Anti-)Selbstdualität. Während im Instanton-Modell das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung beschrieben werden kann, bieten semiklassische Lösungen keine Erklärung für das Confinement der Quarks. Zur Beschreibung des Confinements scheinen niedrigdimensiona-

le Vakuumdefekte wie magnetische Monopole und Vortizes besser geeignet zu sein. Ein anderes Modell des QCD-Vakuums basiert auf der hypothetischen Parallele zu dem Anderson-Modell der Festkörperphysik.

Die genauen Parameter und technischen Details unserer Simulationen bei $T = 0$ werden im ersten Teil des 3. Kapitels dargestellt. Der 2. Teil dieses Kapitels beschreibt die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Analysewerkzeuge zur Charakterisierung der Struktur und Dimension einer beliebigen in die vierdimensionale Raumzeit eingebetteten Dichte. An verschiedenen Stellen dieser Arbeit wird zur Beschreibung zusammenhängender Gebiete diverser Dichten eine Clusteranalyse durchgeführt. Die zur Diskussion der Ergebnisse notwendigen Begriffe und Details der Clusteranalyse werden daher an dieser Stelle verallgemeinert in etwas formalerer Form eingeführt. Abschließend beschreiben wir zwei unterschiedliche Methoden zur Bestimmung der fraktalen Dimension eines Clusters.

In Kapitel 4 werden die wichtigsten spektralen Eigenschaften des Overlap-Operators diskutiert. Ein Vergleich der spektralen Dichte der Eigenmoden mit den Vorhersagen der Zufallsmatrixtheorie erlaubt eine Berechnung des chiralen Kondensats, das als Ordnungsparameter der chiralen Symmetriebrechung agiert.

Die Lokalisierungseigenschaften der Moden werden in Kapitel 5 analysiert. Die Abhängigkeit des inversen Partizipationsverhältnisses (IPR) und seiner höheren Momente von der Ausdehnung des Systems ermöglicht eine Bestimmung der Dimension der Moden und der Betrachtung ihrer Lokalisierungseigenschaften in Abhängigkeit der Stärke ihrer skalaren Dichte. Zur weiteren Charakterisierung der Struktur der Moden wird eine Clusteranalyse der skalaren Dichte durchgeführt.

Während die Nullmoden des Overlap-Operators exakt chiral sind, besitzen die Nichtnullmoden wie im Kontinuum verschwindende Chiralität. Ihre lokale Chiralität weist jedoch eine reiche Struktur auf, die mit den zugrunde liegenden Eichfeldern korreliert ist. In Kapitel 6 betrachten wir daher die Chiralitätseigenschaften der Moden mittels der erstmals von Horváth *et al.* [22] eingeführten lokalen Chiralitätsvariablen $X(x)$.

Kapitel 7 beschreibt die Verteilung der topologischen Ladungsdichte der Eichfeldkonfigurationen. Während in der Vergangenheit verschiedene zu Beginn des Kapitels kurz diskutierte Verfahren zur Glättung der Eichfeldkonfigurationen verwendet wurden, die die Eichfelder jedoch auf unkontrollierte Weise modifizieren und klassischen Lösungen der Feldgleichungen näherbrin-

gen, erlaubt die Verwendung von Overlap-Fermionen eine Einsicht in die topologische Struktur der Felder ohne derartige Modifikationen. Zur Berechnung der topologischen Ladungsdichte verwenden wir zwei unterschiedliche Ansätze. Die im Rahmen dieser Arbeit als „volle“ topologische Ladungsdichte bezeichnete Dichte ist durch die Spur des mit γ_5 multiplizierten Overlap-Operators gegeben und enthält Ladungsfluktuationen aller Skalen, d.h. sowohl kurzreichweitige UV-Fluktuationen auf der Skala des Gitter-Cutoffs als auch langreichweitige IR-Fluktuationen auf der Skala von Λ_{QCD} . Die gezeigten Visualisierungen der vollen Dichte lassen keinerlei Struktur vermuten, eine Clusteranalyse der vollen Dichte und die Bestimmung ihrer Dimension bestätigen jedoch die erstmals in Arbeiten von Horváth *et al.* [23] aufgezeigte dreidimensionale Vorzeichen-kohärente globale Struktur dieser Dichte. Wir erweitern die Analyse dieser Arbeiten durch eine detaillierte Betrachtung der multifraktalen Struktur und Dimension zusammenhängender Cluster mit Ladung $|q(x)|/q_{\text{max}} \geq q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ in Abhängigkeit des Cutoffs $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$. Ein komplementäres Bild des Vakuums der QCD zeigt die trunkierte topologische Ladungsdichte [24]. Diese wird aus den niedrigsten $\mathcal{O}(100)$ Eigenmoden des Overlap-Operators mit $|\lambda| \leq \lambda_{\text{cut}}$ konstruiert. Im Rahmen einer Cluster- und Dimensionsanalyse der trunkierten Dichte in Abhängigkeit von λ_{cut} und $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ werden die wesentlichen Unterschiede zur vollen topologischen Dichte diskutiert. Die Korrelation der Cluster entgegengesetzten Vorzeichens spiegelt sich in dem Ladungskorrelator wider, dessen Form durch das Axiom der Reflexionspositivität diktiert wird. Das Kapitel schließt mit einer Analyse der Korrelation der trunkierten topologischen Dichte und der lokalen Chiralität individueller Eigenmoden des Overlap-Operators.

Die Moden des Overlap-Operators können auch verwendet werden, um eine UV-gefilterte Version des gluonischen Feldstärketensors zu konstruieren. In Kapitel 8 folgen wir einem erstmals von Gattringer [25] vorgeschlagenen Ansatz zur spektralen Darstellung des Feldstärketensors und berechnen trunkierte Versionen der Ladungs- und Wirkungsdichte, sowie des Feldstärketensors selbst. Analog zu der lokalen Chiralitätsvariable $X(x)$ kann ein Maß der lokalen Selbstdualität der zugrunde liegenden Eichfelder $R(x)$ definiert werden. Wir visualisieren die Verteilung der selbstdualen Bereiche und untersuchen deren Struktur anhand einer Clusteranalyse in Abhängigkeit von der Stärke der lokalen Selbstdualität $|R(x)| \geq R_{\text{cut}}$.

Die Trunkierung der spektralen Darstellung der topologischen Ladungsdichte bzw. des Feldstärketensors stellt eine enorme Vereinfachung dar. Die Beschränkung auf nur $\mathcal{O}(100)$ Moden in der spektralen Entwicklung läßt sich nur dann rechtfertigen, wenn auch hadronische Größen durch die niedrig lie-

genden Eigenmoden dominiert werden. Im 9. Kapitel betrachten wir daher Korrelationsfunktionen des Pions und des Vektormesons, sowie der PCAC-Quarkmassen und analysieren die Saturierung dieser Korrelatoren durch den Beitrag der niedrig liegenden Eigenmoden.

Das umfangreiche letzte Kapitel dehnt die Untersuchungen auf dynamische Konfigurationen aus, die die QCD bei endlicher Temperatur in der Nähe des Hochtemperatur-Phasenübergangs beschreiben. Bei Simulationen in der Valenzquark-Approximation agiert der Polyakov-Loop als Ordnungsparameter des Confinement/Deconfinement-Übergangs. Im chiralen Limes hingegen fungiert das chirale Kondensat als Ordnungsparameter und unterscheidet die Phase gebrochener und restaurierter chiraler Symmetrie. Bei realistischen Quarkmassen sind weder Polyakov-Loop noch chirales Kondensat Ordnungsparameter, sollten jedoch trotzdem beide einen raschen Wechsel in der Umgebung des Hochtemperatur-Phasenübergangs zeigen. Trotz großer theoretischer Anstrengungen ist bis heute nicht geklärt, ob es sich bei diesem Übergang um einen Phasenübergang erster oder zweiter Ordnung oder evtl. nur um einen Crossover handelt. Nach einer Diskussion dieser Problematik beschreiben wir die Simulationsparameter, die von der DIK-Kollaboration¹ zur Generierung dynamischer Konfigurationen mit der Wilson-Eichfeldwirkung und $N_f = 2$ Flavours dynamischer Wilson/Clover-Fermionen verwendet werden. Die DIK-Kollaboration hat es sich in der Vergangenheit zur Aufgabe gesetzt, gluonische Aspekte des Hochtemperatur-Übergangs zu untersuchen, die im Zusammenhang mit dem (De-)Confinement der Quarks stehen. In der vorliegenden Arbeit wollen wir jedoch erstmals fermionische, mit der chiralen Symmetrie in Verbindung stehende Aspekte des Phasenübergangs auf den von der DIK-Kollaboration generierten dynamischen Konfigurationen analysieren. Wir verwenden dazu in einem hybriden Ansatz Valenz-Overlap-Fermionen auf Konfigurationen, die den dynamischen Einfluß von $N_f = 2$ Wilson/Clover-Seequarks beschreiben. Analog zu dem Vorgehen bei $T = 0$ diskutieren wir die Verteilung und spektrale Dichte der Eigenmoden, ihre Lokalisierung, sowie ihre chiralen Eigenschaften in der Umgebung des Hochtemperatur-Übergangs. Der Schwerpunkt liegt in der Bestimmung der chiralen Suszeptibilität, die als fermionisches Signal geeignet ist, die kritische Übergangstemperatur zu bestimmen. Ferner wird der Wandel der topologischen und selbstdualen Struktur des QCD-Vakuums im Übergang zu höheren Temperaturen untersucht.

Eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse schließt die Arbeit ab.

¹Die DIK-Kollaboration ist benannt nach den drei wesentlichen Standpunkten ihrer Mitglieder – die Institute DESY Zeuthen, ITEP Moskau und die Universität Kanazawa.

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 QCD im Kontinuum

Die Dynamik der QCD wird als nichtabelsche Yang-Mills-Theorie [9] durch die Wirkung

$$S_{\text{QCD}} = \int d^4x \mathcal{L}_{\text{QCD}} \quad (1.1)$$

mit der aus einem gluonischen und einem fermionischen Term bestehenden Lagrange-Dichte [5, 6]

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{QCD}} &= -\frac{1}{2} \text{Tr} F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x) + \bar{\Psi}(x)(i \not{D} - m)\Psi(x) \\ &= \mathcal{L}_{\text{gauge}} + \mathcal{L}_{\text{fermion}} \end{aligned} \quad (1.2)$$

beschrieben. Hierbei ist der masselose Dirac-Operator durch

$$\not{D} = \sum_{\mu} \gamma_{\mu} D^{\mu} \quad (1.3)$$

gegeben. Die vier γ_{μ} Matrizen genügen in der Minkowski-Metrik $g_{\mu\nu}$ der Clifford-Algebra

$$\{\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}\} = 2g_{\mu\nu} . \quad (1.4)$$

Zur Beschreibung chiraler Eigenschaften ist das pseudoskalare Produkt dieser Matrizen

$$\gamma_5 = i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3 \quad (1.5)$$

mit $\gamma_5^2 = 1$ von herausragender Bedeutung.

1. Grundlagen

Die Fermionen werden durch Quantenfelder $\Psi_{a\mu}^i(x)$ mit Colour- ($i = 1, \dots, 3$), Flavour- ($a = 1, \dots, N_f$) und Spinor-Indizes ($\mu = 1 \dots, 4$) beschrieben.

Die kovarianten Ableitung

$$D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu \quad (1.6)$$

garantiert die lokale Eichinvarianz. Hierbei ist g die unrenormierte Kopplungskonstante der QCD und $F_{\mu\nu}$ der gluonische Feldstärketensor:

$$F_{\mu\nu} = \frac{1}{ig}[D_\mu, D_\nu] \quad (1.7)$$

$$= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu]. \quad (1.8)$$

Für die Felder gilt

$$F^{\mu\nu} = \sum_a F^{\mu\nu a} T_a \quad (1.9)$$

$$A^\mu = \sum_a A^{\mu a} T_a, \quad (1.10)$$

wobei die in dieser komponentenweisen Darstellung auftretenden Generatoren T_a der Colour-SU(3)_c-Gruppe folgende Lie-Algebra-Relation erfüllen:

$$[T_a, T_b] = if_{abc} T_c. \quad (1.11)$$

f_{abc} sind hierbei die Strukturkonstanten der Gruppe SU(3)_c. Die 8 Generatoren der SU(3)_c können via $T_a = 1/2\lambda_a$ durch die hermiteschen Gell-Mann-Matrizen λ_a (s. Anhang (B.2)) dargestellt werden.

Die Wirkung ist invariant unter folgenden simultanen lokalen Eichtransformationen:

$$\Psi(x) \rightarrow G(x)\Psi(x) \quad (1.12)$$

$$\bar{\Psi}(x) \rightarrow \bar{\Psi}(x)G^{-1}(x) \quad (1.13)$$

$$A_\mu(x) \rightarrow G(x)(A_\mu(x) - \frac{i}{g}\partial_\mu)G^{-1}(x), \quad (1.14)$$

woraus das Transformationsverhalten von

$$F_{\mu\nu}(x) \rightarrow G(x)F_{\mu\nu}(x)G^{-1}(x) \quad (1.15)$$

$$D_\mu \rightarrow G(x)D_\mu G^{-1}(x) \quad (1.16)$$

folgt.

Die Quantisierung der Theorie erfolgt am einfachsten mittels des Pfadintegral-Formalismus [26]. Die zentrale Größe dieses Formalismus ist das generierende Funktional

$$Z[\eta, \bar{\eta}, A_\mu] = \frac{1}{Z_0} \int DA_\mu D\bar{\Psi} D\Psi e^{i(S_{\text{gauge}}(A_\mu) + S_{\text{fermion}}(\bar{\Psi}, \Psi, A_\mu) + \int d^4x (\bar{\Psi}(x)\eta(x) + \bar{\eta}(x)\Psi(x))} \quad (1.17)$$

mit der Zustandssumme

$$Z_0 = \int DA_\mu D\bar{\Psi} D\Psi e^{i(S_{\text{gauge}}(A_\mu) + S_{\text{fermion}}(\bar{\Psi}, \Psi, A_\mu))}, \quad (1.18)$$

das sowohl Ausgangspunkt störungstheoretischer wie auch nicht störungstheoretischer Berechnungen in der QCD ist.

Zur Berechnung von Pfadintegralen auf dem Gitter erweist es sich als notwendig, von der Minkowskischen zur euklidischen Formulierung der Feldtheorie [27] überzugehen. Durch eine Wick-Rotation, d.h. einer Drehung der Integrationsebene mit analytischer Fortsetzung zu imaginären Zeiten $t \rightarrow -it$ geht das Pfadintegral in

$$\int D\Psi \dots e^{iS_{\text{QCD}}} \rightarrow \int D\Psi \dots e^{-S_{\text{QCD}}^E} \quad (1.19)$$

über.

Oszillatorisches Verhalten in der Gewichtung der Pfade wird somit bei positiver Wirkung durch exponentiellen Abfall ersetzt. Damit entspricht das Funktionalintegral der mit dem Boltzmann-Faktor gewichteten Zustandssumme der statistischen Mechanik. Diese Analogie eröffnet den Weg zur Anwendung statistischer Methoden in der Quantenfeldtheorie.

Die Wirkung (1.1) geht hierbei in

$$S_{\text{QCD}}^E = \frac{1}{2} \int d^4x \text{Tr} F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x) + \int d^4x \bar{\Psi}(x) (\not{D} + m) \Psi(x) \quad (1.20)$$

über.

Für die γ -Matrizen gilt im euklidischen Raum mit der Metrik $\delta_{\mu\nu}$ für $\mu, \nu = 1, \dots, 4$

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu} \quad (1.21)$$

und ferner

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4, \quad \{\gamma_\mu, \gamma_5\} = 0, \quad \gamma_5^2 = 1. \quad (1.22)$$

Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Darstellung der γ -Matrizen ist im Anhang in (B.1) aufgeföhrt.

Die Fermionfelder und die in (1.17) formal eingeföhrtten Quellen $\eta(x)$ und $\bar{\eta}(x)$ werden in der auf Funktionalintegralen beruhenden Pfadintegral-Quantisierung durch antikommutierende Grassmann-Variable dargestellt, und lassen sich ausintegrieren. Nach der Ausintegration gilt für das generierende Funktional

$$Z[\eta, \bar{\eta}, A_\mu] = \frac{1}{Z_0} \int DA_\mu e^{-S_{\text{eff}}(A_\mu)} e^{\int d^4x d^4y \bar{\eta}(x) D_m^{-1}(x,y) \eta(y)} \quad (1.23)$$

mit der Zustandssumme

$$Z_0 = \int DA_\mu e^{-S_{\text{eff}}(A_\mu)} \quad (1.24)$$

und der effektiven Wirkung

$$S_{\text{eff}}(A_\mu) = S_{\text{gauge}}(A_\mu) - \ln \det(D_m(A_\mu)) . \quad (1.25)$$

Hierin bezeichnet

$$D_m = \not{D} + m \quad (1.26)$$

den massiven euklidischen Dirac-Operator. Die fermionischen Beiträge sind nun in der hochgradig nichtlokalen Fermiondeterminante $\det(D_m(A_\mu))$ zusammengefaßt – das generierende Funktional bzw. die Zustandssumme nimmt somit rein bosonischen Charakter an.

Für Erwartungswerte von rein gluonischen Observablen $O(A_\mu)$ gilt dann

$$\langle O(A_\mu) \rangle = \frac{1}{Z_0} \int DA_\mu O(A_\mu) e^{-S_{\text{eff}}(A_\mu)} . \quad (1.27)$$

Vakuumerwartungswerte von Observablen, die von den Fermionfeldern in der Form

$$O = \Psi(x_1) \bar{\Psi}(y_1) \dots \Psi(x_n) \bar{\Psi}(y_n) \quad (1.28)$$

abhängen, können durch funktionale Ableitung des generierenden Funktionals nach den Quellen berechnet werden. Man erhält dadurch die Greensfunktionen bzw. n -Punkt-Funktionen $G(x_1, y_1, \dots, x_n, y_n)$ der Theorie:

$$G(x_1, y_1, \dots, x_n, y_n) = \frac{\partial^{2n} Z[\bar{\eta}, \eta]}{\partial \bar{\eta}(x_1) \partial \eta(y_1) \dots \partial \bar{\eta}(x_n) \partial \eta(y_n)} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} \quad (1.29)$$

$$= \langle 0 | T \Psi(x_1) \bar{\Psi}(y_1) \dots \Psi(x_n) \bar{\Psi}(y_n) | 0 \rangle . \quad (1.30)$$

Diese Funktionen spielen eine besondere Rolle in jeder Quantenfeldtheorie, da hieraus die Felder und der Hilbert-Raum rekonstruiert werden können [28]. Im einfachsten Fall ergibt sich der Quarkpropagator

$$D_m^{-1}(x, y) = G(x, y) = \frac{\partial^2 Z[\bar{\eta}, \eta]}{\partial \bar{\eta}(x) \partial \eta(y)} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} \quad (1.31)$$

$$= \langle 0 | T \Psi(x) \bar{\Psi}(y) | 0 \rangle \quad (1.32)$$

$$= \overline{\Psi(x) \bar{\Psi}(y)} . \quad (1.33)$$

Im allgemeinen Fall werden durch mehrfache funktionale Ableitung des generierenden Funktionals nach den Quellen die bilinear auftretenden Felder $\Psi(x_i)$ und $\bar{\Psi}(y_i)$ unter Bildung aller möglichen Kontraktionen durch Propagatoren substituiert. Dies ist Gegenstand des bekannten Wick'schen Theorems.

Damit euklidische Greensfunktionen in die Minkowski-Metrik zurücktransformiert werden können, müssen sie u.a. die Eigenschaft der Reflexionspositivität erfüllen, wie von Osterwalder und Schrader axiomatisch gezeigt wurde [29, 30]. Die euklidische Zeitreflexion ist wie folgt definiert

$$\Theta(\underline{x}, x_4) = (\underline{x}, -x_4) . \quad (1.34)$$

Das Axiom der Reflexionspositivität verlangt, daß es eine antilineare Abbildung Θ gibt, die eine beliebige Funktion F von Feldern mit positiver Zeit in die Funktion ΘF der Felder mit negativer Zeit transformiert, so daß die Bedingung

$$\langle (\Theta F) F \rangle \geq 0 \quad (1.35)$$

erfüllt ist. Nur dann kann eine Hamilton-Funktion definiert und ein Hilbert-Raum mit positiver Norm konstruiert werden.

Die Eigenschaft der Reflexionspositivität wird auch bei der Untersuchung der topologischen Struktur des Vakuums eine wichtige Rolle spielen (vgl. Abschnitt 7.4).

Da ferner die spektralen Eigenschaften des Dirac-Operators von Bedeutung sein werden, sollen hier die wesentlichen Eigenschaften im euklidischen Kontinuum zusammengefaßt werden.

Aus der Antihermitizität der partiellen Ableitungen ∂^μ und der Hermitizität der Gell-Mann-Matrizen folgt die Antihermitizität des Dirac-Operators

$$\mathcal{D} = - \mathcal{D}^\dagger , \quad (1.36)$$

dessen Eigenwerte $i\lambda_i$ mit $\lambda_i \in \mathbb{R}$ somit im Euklidischen rein imaginär sind.

Aus der Algebra der γ -Matrizen (1.21) folgt das Verschwinden des folgenden Kommutators

$$\{\mathcal{D}, \gamma_5\} = 0. \quad (1.37)$$

Für \mathcal{D} gelten damit folgende Eigenwertgleichungen:

$$\mathcal{D}|\psi_i(x)\rangle = i\lambda_i|\psi_i(x)\rangle \quad (1.38)$$

$$\mathcal{D}\gamma_5|\psi_i(x)\rangle = -\gamma_5\mathcal{D}|\psi_i(x)\rangle = -i\lambda_i\gamma_5|\psi_i(x)\rangle, \quad (1.39)$$

so daß die Eigenmoden in Paaren

$$(i\lambda_i, |\psi_i(x)\rangle), (-i\lambda_i, \gamma_5|\psi_i(x)\rangle) \quad (1.40)$$

auftreten.

Die Nullmoden mit $\lambda_i = 0$ können so gewählt werden, daß sie simultan Eigenmoden des Chiralitätsoperators γ_5 sind. Die Chiralität χ_i einer Nullmode $|\psi_0(x)\rangle$ ist durch die Eigenwerte von γ_5 definiert

$$\gamma_5|\psi_0(x)\rangle = \chi_0|\psi_0(x)\rangle = \pm|\psi_0(x)\rangle \quad (1.41)$$

und kann wegen $\gamma_5^2 = 1$ nur die Werte ± 1 annehmen.

Für den massiven Dirac-Operator (1.26) ist dies nicht mehr der Fall. Die chirale Symmetrie wird durch endliche Quarkmassen explizit gebrochen.

Sowohl für den masselosen Operator \mathcal{D} als auch den massiven Operator D_m gelten die Eigenschaften der Normalität:

$$[\mathcal{D}, \mathcal{D}^\dagger] = 0 \quad (1.42)$$

$$[D_m, D_m^\dagger] = 0 \quad (1.43)$$

und aufgrund (1.36,1.37) auch die sog. γ_5 -Hermitezität

$$\gamma_5\mathcal{D}\gamma_5 = \mathcal{D}^\dagger \quad (1.44)$$

$$\gamma_5 D_m \gamma_5 = D_m^\dagger. \quad (1.45)$$

1.2 Chirale Symmetrie

Aufgrund der Flavour-Unabhängigkeit der Colour-SU(3)_c-Eichtransformationen genügt die Lagrange-Dichte der QCD, wenn sie auf N_f Flavours beschränkt wird, der globalen approximativen Flavour-Symmetrie des freien Flavour-SU(N_f)-Quarkmodells [13, 14] und implementiert auch alle Quantenzahlen dieses Modells. Da diese Symmetrie durch die Massen der schweren Quarks stark gebrochen wird, beschränken wir uns bei der Diskussion auf den Fall $N_f = 3$.

Für den fermionische Anteil der Lagrange-Dichte gilt

$$\mathcal{L}_{\text{fermion}} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1 = \bar{\Psi} \not{D}\Psi + \bar{\Psi} m \Psi \quad (1.46)$$

mit $\bar{\Psi} m \Psi = \bar{\Psi}_u m_u \Psi_u + \bar{\Psi}_d m_d \Psi_d + \bar{\Psi}_s m_s \Psi_s$.

Mittels der Projektoren

$$P_{\pm} = \frac{1 \pm \gamma_5}{2} \quad (1.47)$$

mit den Eigenschaften $P_+ + P_- = 1$, $P_+ P_- = P_- P_+ = 0$ lassen sich Ψ und $\bar{\Psi}$ in Spinoren positiver und negativer Chiralität zerlegen

$$\Psi = P_+ \Psi + P_- \Psi = \Psi_+ + \Psi_- \quad (1.48)$$

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi} P_+ + \bar{\Psi} P_- = \bar{\Psi}_- + \bar{\Psi}_+ . \quad (1.49)$$

Damit gilt für die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_0 = \bar{\Psi}_- \not{D}\Psi_- + \bar{\Psi}_+ \not{D}\Psi_+ \quad (1.50)$$

$$\mathcal{L}_1 = \bar{\Psi}_- m \Psi_+ + \bar{\Psi}_+ m \Psi_- , \quad (1.51)$$

wobei in der Herleitung die Beziehung (1.37) von großer Bedeutung ist.

Im chiralen Limes $m \rightarrow 0$ entkoppeln die Terme positiver und negativer Chiralität komplett und \mathcal{L}_0 ist invariant unter unabhängigen Transformationen $\Psi_{\pm} \rightarrow U_{\pm} \Psi_{\pm}$ mit $\Psi \rightarrow (U_- P_- + U_+ P_+) \Psi$, wobei $U_{\pm} \in \text{U}(3)_{\pm}$.

Die $2N_f^2 = 18$ dimensionalen Symmetriegruppe

$$\text{U}(3)_- \otimes \text{U}(3)_+ = \text{U}(3)_{V-A} \otimes \text{U}(3)_{V+A} \quad (1.52)$$

$$= \text{SU}(3)_- \otimes \text{SU}(3)_+ \otimes \text{U}(1)_- \otimes \text{U}(1)_+ \quad (1.53)$$

wird chirale Symmetrie genannt.

1. Grundlagen

Nach dem Noether-Theorem impliziert jede kontinuierliche Symmetrietransformation $\Psi(x) \rightarrow U\Psi(x)$, die die Wirkung invariant läßt, einen erhaltenen Strom $\partial^\mu J_\mu(x) = 0$ und eine damit assoziierte Ladung $Q(t) = \int d^3x J_0(\underline{x}, t)$.

Die assoziierten Ströme der $SU(3)_\pm$ -Untergruppe

$$J_{\mu\pm}^a(x) = \frac{1}{2}(V_\mu^a(x) \pm A_\mu^a(x)) \quad (1.54)$$

sind durch die Flavour-Oktett-Vektorströme $V_\mu^a(x)$ und Axialvektorströme $A_\mu^a(x)$ gegeben.

Die Ströme der $U(1)_\pm$ -Untergruppe

$$J_{\mu\pm}(x) = \frac{1}{2}(V_\mu(x) \pm A_\mu(x)) \quad (1.55)$$

entsprechend durch die Flavour-Singulett-Ströme $V_\mu(x)$ und $A_\mu(x)$.

Die Bezeichnung „chirale Symmetrie“ ist darauf zurückzuführen, daß die Ströme $J_{\mu\pm}^a(x)$ und die damit verbundenen Ladungen unter Paritätstransformationen ineinander übergehen.

Das Transformationsverhalten der Spinoren unter den Vektor- bzw. Axialvektortransformationen ist in Tabelle 1.1 zusammen mit den assoziierten 18 Noether-Strömen und den Invarianzeigenschaften der Lagrange-Dichte dargestellt.

$U(3)_V$ $SU(3)_V$ $\Psi(x) \rightarrow U_V^a \Psi(x)$ $U_V^a = e^{i\omega_V^a T^a}$ \mathcal{L} inv. f. $m_u = m_d = m_s$		$U(1)_V$ $\Psi(x) \rightarrow U_V \Psi(x)$ $U_V = e^{i\omega_V}$ \mathcal{L} invariant		$U(3)_A$ $SU(3)_A$ $\Psi(x) \rightarrow U_A^a \Psi(x)$ $U_A^a = e^{i\omega_A^a \gamma_5 T^a}$ \mathcal{L} inv. für $m_u = m_d = m_s = 0$		$U(1)_A$ $\Psi(x) \rightarrow U_A \Psi(x)$ $U_A = e^{i\omega_A \gamma_5}$ \mathcal{L} inv. für $m_u = m_d = m_s = 0$	
Vektorstrom		Axialvektorstrom					
Flavour-Oktett	Flavour-Singulett	Flavour-Oktett	Flavour-Oktett		Flavour-Singulett		
$V_\mu^a(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_\mu T^a \Psi(x)$	$V_\mu(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_\mu \Psi(x)$	$A_\mu^a(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_5 \gamma_\mu T^a \Psi(x)$	$A_\mu^a(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_5 \gamma_\mu T^a \Psi(x)$		$A_\mu(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_5 \gamma_\mu \Psi(x)$		
$\partial^\mu V_\mu^a(x) = 0$	$\partial^\mu V_\mu(x) = 0$	$\partial^\mu A_\mu^a(x) = 2m_q P^a(x)$	$\partial^\mu A_\mu^a(x) = 2m_q P^a(x)$		$\partial^\mu A_\mu(x) = 2m_q P(x) + 2N_f q(x)$		

Tabelle 1.1: Transformationsverhalten der Spinoren Ψ unter der Flavour-Symmetriegruppe, Invarianzeigenschaften der Lagrange-Dichte, sowie assoziierte Noether-Ströme und deren Ableitungen.

Bei endlichen nicht entarteten Quarkmassen bleibt einzig der Flavour-Singulett-Vektorstrom $V_\mu(x)$ erhalten. Im Falle entarteter Massen ist auch der Flavour-Oktett-Vektorstrom $V_\mu^a(x)$ erhalten, während in der Ableitung der

Axialvektorströme ein Term auftaucht, der proportional zur pseudoskalaren Dichte

$$P^a(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_5 T^a \Psi(x) \text{ bzw. } P(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma_5 \Psi(x) \quad (1.56)$$

ist. Der Flavour-Singulett-Axialvektorstrom ist auch im Falle verschwindender Quarkmassen nicht erhalten, sondern proportional zur topologischen Ladungsdichte $q(x)$ (vgl. Abschnitt 1.2.3 und 7.1).

Die globale $U(3)_- \otimes U(3)_+$ -Symmetrie würde erwarten lassen, daß Elementarteilchen degenerierte Multipletts beider Chiralitäten bilden, die unter irreduziblen Darstellungen dieser Gruppe transformieren. Etwa sollte das Oktett pseudoskalarer Mesonen von einem Oktett skalarer Mesonen begleitet sein. Im Experiment lassen sich jedoch keine massenentarteten Partnermultipletts beobachten – die volle Symmetrie der Lagrange-Dichte \mathcal{L}_0 ist im Teilchenspektrum des Grundzustandes nicht realisiert.

Eine der bedeutendsten Erkenntnisse der Quantenfeldtheorie ist, daß Symmetrien sich auf unterschiedliche Weise in der Natur manifestieren. Wesentlich hierbei ist, daß eine Symmetrie nicht nur durch die Invarianz der Lagrange-Dichte unter Symmetrietransformationen charakterisiert wird, sondern auch die Invarianz des Vakuums eine entscheidende Rolle spielt. Bei der Realisierung bzw. Brechung der globalen Symmetrie (1.53) spielen verschiedene Kategorien möglicher Realisierungen von Symmetrien eine Rolle.

1.2.1 Die $U(3)_V$ -Symmetrie

Die globale $U(3)_V$ -Symmetrie ist nach dem Vafa-Witten-Theorem [31] im Wigner-Modus realisiert, d.h. neben der Lagrange-Dichte ist auch das Vakuum $|0\rangle$ invariant unter den vektoriiellen Symmetrietransformationen

$$U_V^{(a)}|0\rangle = |0\rangle . \quad (1.57)$$

Die $U(1)_V$ -Symmetrie drückt die Erhaltung der Baryonenzahl aus. Die $SU(3)_V$ -Symmetrie manifestiert sich in der degenerierten Multiplett-Struktur des Spektrums vektoriieller Teilchen. Ein Term wie \mathcal{L}_1 mit nichtentarteten Massen bricht die $SU(3)_V$ -Symmetrie explizit. Sind die Störungen der exakten Symmetrie jedoch klein, so ist die Entartung innerhalb der Multipletts nur geringfügig aufgehoben und die Symmetrie bleibt näherungsweise realisiert.

Durch Hinzunahme etwa von Termen, die von der elektroschwachen Hyperladung Y abhängen, wird die $SU(3)_V$ -Flavour-Symmetrie explizit auf die

Isospin-SU(2)-Symmetrie reduziert, die wiederum durch die Hinzunahme etwa der Coulomb Wechselwirkung auf die U(1)-Ladungssymmetrie reduziert wird, die letztendlich von allen bekannten Wechselwirkungen erhalten wird. Eine derartige Hierarchie von Symmetrien ist typisch für diesen Modus der Symmetriebrechung.

1.2.2 Die SU(3)_A-Symmetrie

Die globale SU(3)_A-Symmetrie hingegen ist in der chiral gebrochenen Phase der QCD im Goldstone-Modus realisiert, d.h. während \mathcal{L}_0 invariant unter Symmetrietransformationen ist, gilt dies nicht für das Vakuum:

$$U_A^a |0\rangle \neq |0\rangle . \quad (1.58)$$

In diesem Fall spricht man von spontaner Symmetriebrechung, wobei die ursprüngliche Symmetrie nur verborgen in Erscheinung tritt.

Nach dem berühmten Nambu-Goldstone-Theorem [32, 33, 34, 35, 36] tritt bei der spontanen Brechung einer kontinuierlichen globalen Symmetrie für jeden Generator der gebrochenen Symmetriegruppe ein masseloses skalares Feld, ein sog. Goldstone-Boson auf. Für jeden der acht SU(3)-Generatoren sollte demnach ein masseloses Goldstone-Boson existieren. Das Oktett der pseudoskalaren Mesonen ist ein geeigneter Kandidat und wäre nach dem Nambu-Goldstone-Theorem masselos, wenn nicht ein die axiale Symmetrie explizit brechender Term \mathcal{L}_1 in der Lagrange-Dichte auftauchen würde. Die Goldstone-Bosonen $\pi^a(p)$ sind direkt an die nicht erhaltenen Ströme A_μ^a (vgl. Tabelle 1.1) gekoppelt. Unter der Annahme, daß die SU(3)_A-Symmetrie nur sehr schwach gebrochen ist, folgt für die Divergenz des Axialvektorstroms

$$\langle 0 | \partial^\mu A_\mu^a(0) | \pi^b(p) \rangle = \delta^{ab} f_\pi m_\pi^2 . \quad (1.59)$$

Hierbei ist $m_\pi \approx 134.98$ MeV [16] die Pionmasse und $f_\pi \approx 92.4$ MeV [16] die Pion-Zerfallskonstante, die in $\pi^+ \rightarrow l^+ + \nu_l$ Zerfällen gemessen werden kann. Die Operatorversion der Gleichung (1.59) wird als PCAC- (Partially conserved axial-vector current) Relation bezeichnet und ist die Basis von sog. „soft pion“ Theoremen bei niedrigen Energien, wie etwa die Goldberger-Treiman-Relation oder die Adler-Weisberger-Summenregel [37]. Die gute Übereinstimmung derartiger Theoreme mit experimentellen Werten stützt das theoretische Konzept der chiralen Symmetrie.

In 1. Ordnung der chiralen Störungstheorie läßt sich eine Beziehung zwischen der Pion- und Quarkmasse sowie der Pion-Zerfallskonstante herleiten, die als

Gell-Mann-Oakes-Renner-Relation [38] bekannt ist

$$f_\pi^2 m_\pi^2 = -2m_q \langle \bar{\Psi} \Psi \rangle + \mathcal{O}(m_q^2). \quad (1.60)$$

Im Zusammenhang mit Gleichung (1.59) wird deutlich, daß der Axialvektorstrom nur dann nicht erhalten ist, wenn das chirale Kondensat

$$\langle \bar{\Psi} \Psi \rangle = \langle 0 | \bar{\Psi} \Psi | 0 \rangle = \langle 0 | \bar{\Psi}_- \Psi_+ + \bar{\Psi}_+ \Psi_- | 0 \rangle = -\Sigma \quad (1.61)$$

nicht verschwindet.

Dieses fungiert demnach als Ordnungsparameter der chiralen $SU(3)_A$ -Symmetriebrechung. Von besonderer Bedeutung ist, daß die Bildung eines nichtverschwindenden chiralen Kondensats ein rein nichtperturbativer Effekt ist. Ist die Symmetrie nicht spontan gebrochen, ist der Grundzustand invariant unter chiralen Transformationen und der Vakuumerwartungswert $\langle \bar{\Psi} \Psi \rangle$ verschwindet.

Aus (1.33) folgt, daß das chirale Kondensat als Spur des Quarkpropagators geschrieben werden kann. Unter Verwendung der Spektraldarstellung des Propagators

$$G(x, y) = \sum_i \frac{1}{i\lambda_i + m_q} |\psi_i(x)\rangle \langle \psi_i(y)| \quad (1.62)$$

gilt somit

$$\langle \bar{\Psi}(x) \Psi(x) \rangle = -\text{Tr}_{\text{CS}} G(x, x) = -\sum_i \frac{1}{i\lambda_i + m_q} \langle \psi_i(x) | \psi_i(x) \rangle. \quad (1.63)$$

Nach Erweiterung mit $(i\lambda_i - m_q)$ gilt

$$\langle \bar{\Psi}(x) \Psi(x) \rangle = \sum_i \left(\frac{i\lambda_i}{\lambda_i^2 + m_q^2} \right) \langle \psi_i(x) | \psi_i(x) \rangle - \sum_i \left(\frac{m_q}{\lambda_i^2 + m_q^2} \right) \langle \psi_i(x) | \psi_i(x) \rangle. \quad (1.64)$$

Da die Nichtnullmoden des Dirac-Operators stets in Paaren (1.40) auftreten verschwindet der erste Term. Nach der Mittelung über alle Eichfelder wird der Erwartungswert $\langle \bar{\Psi}(x) \Psi(x) \rangle$ translationsinvariant, so daß sich die Gleichung über das zunächst als endlich angenommene Volumen V integrieren läßt. Bei normierten Eigenfunktionen $\int d^4x \langle \psi_i(x) | \psi_i(x) \rangle = 1$ gilt dann

$$\langle \bar{\Psi} \Psi \rangle = -\frac{1}{V} \sum_i \frac{m_q}{\lambda_i^2 + m_q^2}. \quad (1.65)$$

Beim Übergang in den chiralen Limes und ins unendliche Volumen ist nun die Reihenfolge der Limiten von besonderer Bedeutung. Würde man $\lim_{V \rightarrow \infty} \lim_{m_q \rightarrow 0} \langle \bar{\Psi} \Psi \rangle$ betrachten, so würden lediglich die exakten Nullmoden beitragen. Bildet man jedoch zunächst den Limes $\lim_{V \rightarrow \infty}$, so wird das Eigenwertspektrum dicht und man kann eine mittlere Eigenwertdichte $\rho(\lambda)$ einführen. Da bei konstanter topologischer Suszeptibilität (s. (7.3)) die typische Anzahl der Nullmoden mit \sqrt{V} wächst, während die Gesamtzahl der niedrig liegenden Moden linear mit dem Volumen anwächst, kann im unendlichen Volumen der Beitrag der Nullmoden vernachlässigt werden.

Ersetzt man die Summation in (1.65) durch ein Integral über diese Dichtefunktion, schreibt sich das chirale Kondensat als

$$\langle \bar{\Psi} \Psi \rangle = - \int d\lambda \rho(\lambda) \left(\frac{m_q}{\lambda^2 + m_q^2} \right) \quad (1.66)$$

und geht im $\lim_{m_q \rightarrow 0}$ in die auf Banks und Casher [21] zurückgehende Relation

$$\langle \bar{\Psi} \Psi \rangle = -\Sigma = -\pi \rho(0) \quad (1.67)$$

über. Diese verbindet das chirale Kondensat mit der Dichte der Nichtnullmoden nahe Null $\rho(0) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho(\lambda)$. Die Nullmoden selber gehen nicht in die Relation ein und spielen daher bei der spontanen Brechung der chiralen Symmetrie keine Rolle.

1.2.3 Die anomale $U(1)_A$ -Symmetrie

Man spricht von einer anomalen Symmetrie einer Theorie, falls diese auf klassischer Ebene gegeben ist, jedoch nach Quantisierung der Theorie nicht mehr realisiert wird. Würde die Brechung der $U(1)_A$ -Symmetrie vom Nambu-Goldstone-Theorem beschrieben werden, müßte ein Teilchen mit einer dem Pion entsprechenden Masse als Quasi-Goldstone-Boson existieren. Das η' -Teilchen wäre bzgl. seiner Quantenzahlen ein geeigneter Kandidat, jedoch ist seine Masse viel zu groß, um als approximatives Goldstone-Boson zu fungieren. Eine Lösung dieses sog. „ $U(1)_A$ -Problems“ wurde von 't Hooft [39] im Rahmen des Instanton-Modells gegeben. Die Adler-Bell-Jackiw-Anomalie [40, 41] des Axialvektorstroms führt dazu, daß der Flavour-Singulett-Axialvektorstrom (s. Tabelle 1.1) auch bei verschwindender Quarkmasse nicht erhalten ist, sondern proportional der topologischen Ladungsdichte $q(x)$ ist (vgl. 7.1).

1.3 Diskretisierung des euklidischen Raumes

Bei der Diskretisierung der Raumzeit wird das euklidische Kontinuum durch ein hyperkubisches Gitter ersetzt. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich isotrope Gitter mit einheitlichen Gitterabständen a eingesetzt. Die verwendeten Gitter haben dabei in den räumlichen Richtungen die gleiche Ausdehnung L_s in Einheiten des Gitterabstandes a , während sich die Zeitrichtung L_t von der räumlichen Ausdehnung L_s unterscheidet. Das Gittervolumen wird mit V_{lat} bezeichnet, das physikalische Volumen mit $V = a^4 V_{\text{lat}}$. Die Thermodynamik der QCD kann im sog. thermodynamischen Limes mit $L_s \rightarrow \infty$ und endlicher Ausdehnung in Zeitrichtung L_t beschrieben werden, wobei L_t mit der Temperatur des Systems verbunden ist (vgl. Kapitel 10). Ist $L_t \ll L_s$, so lassen sich Temperaturen simulieren, die in der Nähe des Phasenübergangs der QCD liegen. Ist $L_t \gg L_s$, so liegt die Temperatur des Systems weit unterhalb dieses Übergangs. In den zunächst beschriebenen Simulationen verwenden wir Gitter mit $L_t = 2L_s$. Da dieser Fall kleinen Temperaturen unterhalb des Phasenübergangs entspricht, wird er im Rahmen dieser Arbeit als „ $T = 0$ “ bezeichnet. Im letzten Kapitel wird ein $24^3 \times 10$ -Gitter verwendet, um die QCD bei höheren Temperaturen zu erforschen.

Die Diskretisierung der Raumzeit hat zwei unterschiedliche Funktionen. Zum einen ermöglicht sie numerische Simulationen, zum anderen bietet sie eine Regularisierung der QCD. Während in der perturbativen QCD eingesetzte Regularisierungsverfahren nur innerhalb dieser Näherung gültig sind, erlaubt die Gitterregularisierung auch ein Erforschen nichtperturbativer Phänomene.

In der auf Wilson [15] zurückgehenden Gitter-QCD werden fermionische Felder $\Psi(x)$ mit den Gitterpunkten $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ assoziiert, während die Eichfelder durch sog. „Links“ zwischen diesen Gittern dargestellt werden.

Die Link-Variable $U_\mu(x)$ ist hierbei eine Diskretisierung des im Kontinuum wie folgt definierten Paralleltransport-Operators

$$U(x, y) = \mathcal{P} e^{\int_x^y dx_\mu igA_\mu(x)} , \quad (1.68)$$

wobei \mathcal{P} der Pfadordnungsoperator ist.

Auf dem Gitter ist der kleinstmögliche Paralleltransport durch den Gitterabstand a festgelegt, so daß (1.68) wie folgt diskretisiert werden kann

$$U_\mu(x) = U(x, x + \hat{\mu}) = \overset{x}{\bullet} \xrightarrow[U_\mu(x)]{\hspace{1.5cm}} \overset{x + \hat{\mu}}{\bullet} = 1 + igaA_\mu + \mathcal{O}(a^2) , \quad (1.69)$$

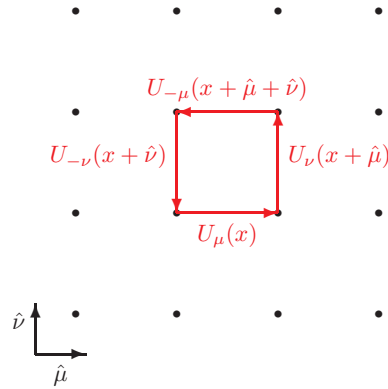


Abbildung 1.1: Die Wilson-Plaquette als einfachste Form eines geschlossenen Wilson-Loops auf dem Gitter.

wobei $\hat{\mu}$ den Einheitsvektor in der μ -Richtung bezeichnet. Für negativen Link-Index $-\mu$ gilt

$$U_{-\mu}(x) = U(x, x - \hat{\mu}) = \overset{\leftarrow}{\underset{U_{-\mu}(x)}{x - \hat{\mu}}} \vec{x} = U^\dagger(x - \hat{\mu}, x) . \quad (1.70)$$

Im Gegensatz zu den Feldern $A_\mu(x)$, die in der Lie-Algebra der Gruppe $SU(3)_c$ liegen, sind die Link-Variablen $U_\mu(x)$ Elemente der Lie-Gruppe selbst.

Unter lokalen Eichtransformationen $G(x) \in SU(3)_c$ transformieren Fermionen $\Psi(x)$ und Eichfeld-Links $U_\mu(x)$ wie folgt

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\rightarrow G(x)\Psi(x) \\ \bar{\Psi}(x) &\rightarrow \bar{\Psi}(x)G^{-1}(x) \end{aligned} \quad (1.71)$$

$$\begin{aligned} U_\mu(x) &\rightarrow G(x)U_\mu(x)G^{-1}(x + \hat{\mu}) \\ U_\mu^\dagger(x) &\rightarrow G(x + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x)G^{-1}(x) . \end{aligned} \quad (1.72)$$

Daraus folgt, daß das geordnete Produkt von Eichfeldern entlang geschlossener Pfade, sog. Wilson-Loops, ebenfalls eichinvariant ist. Die einfachste Form eines Wilson-Loops ist die in Abbildung 1.1 dargestellte Plaquette

$$U_P(x) = U_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_{-\mu}(x + \hat{\mu} + \hat{\nu})U_{-\nu}(x + \hat{\nu}) \quad (1.73)$$

$$= U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x) . \quad (1.74)$$

1.3.1 Die Wilson-Eichfeldwirkung

Die auf Wilson [15] zurückgehende Eichfeldwirkung basiert auf der Plaquettenvariable $U_P(x)$ und ist im Falle der $SU(N)_c$ wie folgt definiert:

$$S_W(U) = \sum_P S_P(U_P) = \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} S_P(U_{\mu\nu}(x)) \quad (1.75)$$

mit

$$S_P(U_P) = \frac{\beta}{N} \operatorname{Re} \operatorname{Tr}(\mathbb{1} - U_P) \quad (1.76)$$

$$= \beta \left(1 - \frac{1}{3} \operatorname{Re} \operatorname{Tr} U_P\right) \text{ für } SU(3)_c. \quad (1.77)$$

Der Kontinuums-Limes kann leicht berechnet werden, indem die Faktoren der Plaquettenvariable nach (1.68) in Exponentialform geschrieben werden und eine Verallgemeinerung der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel benutzt wird. Damit folgt für die Plaquette

$$U_P(x) = \mathbb{1} + i g a^2 F_{\mu\nu}(x) - \frac{g^2 a^4}{2} F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x) + \mathcal{O}(a^6) \quad (1.78)$$

und für die Wilson-Wirkung selbst

$$S_W(U) = \frac{\beta g^2}{2N} \frac{1}{2} a^4 \sum_x \operatorname{Tr} F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x) + \mathcal{O}(a^2). \quad (1.79)$$

Damit die korrekte Kontinuums-Wirkung (1.20) reproduziert wird, muß folgender Zusammenhang zwischen der in der Gittertheorie allgemein verwendeten Kopplungskonstante β und der unrenormierten Kopplungskonstante g der QCD bestehen:

$$\beta = \frac{2N}{g^2}. \quad (1.80)$$

Untersuchungen der topologischen Suszeptibilität basierend auf der geometrischen Methode zur Ladungsbestimmung (vgl. Abschnitt 7.1.1) unter Verwendung der Wilson-Eichfeldwirkung haben gezeigt, daß unphysikalische kurzreichweitige Fluktuationen, sog. Dislokationen, UV-divergente Beiträge zu topologischen Größen beisteuern können, die auch im (Quanten-) Kontinuums-Limes nicht verschwinden, wenn die Wirkung dieser Fluktuationen S/β kleiner als $48\pi^2/(11N^2)$ ($= 4.8$ für $SU(N=3)_c$) ist [42, 43]. Durch die Wahl einer verbesserten Wirkung kann jedoch deren minimale Wirkung über diesen kritischen Wert angehoben werden. Auch die $\mathcal{O}(a^2)$ -Diskretisierungsfehler (1.79)

der Wilson-Eichfeldwirkung können reduziert werden, indem der Wirkung nach dem Verbesserungsschema von Symanzik [44, 45] im Kontinuums-Limes verschwindende eichinvariante Terme hinzugefügt werden. Ein wichtiges Beispiel einer derart verbesserten Wirkung ist die Lüscher-Weisz-Wirkung [46], die im Rahmen dieser Arbeit bei den Simulationen mit $T = 0$ eingesetzt wird.

1.3.2 Die Lüscher-Weisz-Eichfeldwirkung

Zur Reduzierung der $\mathcal{O}(a^2)$ -Diskretisierungsfehler der Wilson-Eichfeldwirkung werden in der Lüscher-Weisz-Wirkung [46] neben der Summe über alle Plaquetten U_P auch noch Summen über alle 2×1 Rechtecke U_R und alle $1 \times 1 \times 1$ Parallelelogramme U_{PG} der Länge 6 aufgenommen.

Mit

$$U_P = \begin{array}{c} \leftarrow \\ \square \\ \rightarrow \\ \leftarrow \end{array}, \quad U_R = \begin{array}{c} \leftarrow \\ \text{---} \\ \leftarrow \\ \leftarrow \\ \text{---} \\ \rightarrow \end{array}, \quad U_{PG} = \begin{array}{c} \leftarrow \\ \text{---} \\ \leftarrow \\ \text{---} \\ \leftarrow \\ \text{---} \\ \rightarrow \end{array} \quad (1.81)$$

ist diese Wirkung wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} S(U) &= \beta \sum_P \frac{1}{3} \text{Re Tr} [1 - U_P] + \beta_R \sum_R \frac{1}{3} \text{Re Tr} [1 - U_R] \\ &+ \beta_{PG} \sum_{PG} \frac{1}{3} \text{Re Tr} [1 - U_{PG}]. \end{aligned} \quad (1.82)$$

Durch geeignete Wahl der Koeffizienten β , β_R und β_{PG} können die $\mathcal{O}(a^2)$ -Diskretisierungseffekte gegenseitig aufgehoben werden. Hierbei ist β der primäre Parameter, während β_R und β_{PG} in der Tadpole-verbesserten Störungstheorie aus β berechnet wurden [47, 48, 49, 50].

Die Koeffizienten ergeben sich hierbei als Funktion der Plaquettenvariable U_P :

$$\beta_R = -\frac{\beta}{20 u_0^2} (1 + 0.4805 \alpha), \quad \beta_{PG} = -\frac{\beta}{u_0^2} 0.03325 \alpha, \quad (1.83)$$

mit

$$u_0 = \left(\frac{1}{3} \text{Re Tr} \langle U_P \rangle \right)^{1/4}, \quad \alpha = -\frac{\ln \left(\frac{1}{3} \text{Re Tr} \langle U_P \rangle \right)}{3.06839}. \quad (1.84)$$

Die Beziehung zwischen β und der Kopplung g ist durch

$$\frac{g^2}{6}(\beta + 8\beta_R + 8\beta_{\text{PG}}) = 1 \quad (1.85)$$

festgelegt.

In [51] wurden die Koeffizienten β_R und β_{PG} für sechs β -Werte im Intervall $[8.00, 8.60]$ selbstkonsistent aus u_0 und α bestimmt. Das Ergebnis dieser Rechnung zeigt Tabelle 1.2.

β	8.00	8.10	8.20	8.30	8.45	8.60
u_0^4	0.62107(3)	0.62894(3)	0.63599(3)	0.64252(3)	0.65176(3)	0.66018(3)
β_R	-0.54574	-0.54745	-0.54998	-0.55332	-0.55773	-0.56345
β_{PG}	-0.05252	-0.05120	-0.05020	-0.04953	-0.04829	-0.04755

Tabelle 1.2: Parameter der Lüscher-Weisz-Wirkung. Aufgeführt sind die in [51] für $\beta \in [8.00, 8.60]$ selbstkonsistent aus u_0 und α ermittelten Werte von β_R und β_{PG} sowie der Erwartungswert der Plaquette $u_0^4 = \text{Re Tr}\langle U_P \rangle/3$.

1.3.3 Der naive Dirac-Operator

In der naiven Diskretisierung werden die Ableitungen ∂_μ in der euklidischen fermionischen Wirkung durch die symmetrisierte Differenz

$$\partial_\mu \Psi(x) \rightarrow \frac{1}{2a}(\Psi(x + \hat{\mu}) - \Psi(x - \hat{\mu})) \quad (1.86)$$

ersetzt.

Unter Berücksichtigung des Transformationsverhaltens (1.72) unter Eichtransformationen lassen sich geeignete Link-Variablen so in die diskretisierte Wirkung einfügen, daß diese lokal eichinvariant ist. Damit gilt für die naive Wirkung

$$S_{\text{naiv}} = a^4 \sum_{x,y} \bar{\Psi}(x) K(x, y) \Psi(y) \quad (1.87)$$

mit dem Dirac-Operator

$$K(x, y; m) = a^{-1} \sum_{\mu} \frac{1}{2} \gamma_{\mu} [U_{\mu}(x) \delta(x + \hat{\mu}, y) - U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu}) \delta(x - \hat{\mu}, y) + am \delta(x, y)]. \quad (1.88)$$

Betrachtet man im freien Fall ($U_\mu(x) = 1$) den Fourier-transformierten Quarkpropagator $\tilde{G}(p)$ der naiven Wirkung im Impulsraum,

$$a^{-1}\tilde{G}(p) = a^{-1}\tilde{K}^{-1}(p) = \frac{am - i\sin(ap_\mu)\gamma_\mu}{\sum_\mu \sin^2(ap_\mu) + (am)^2}, \quad (1.89)$$

so sieht man, daß der Propagator für $\sin(ap_\mu) \ll 1$ im Kontinuums-Limes $a \rightarrow 0$ in die korrekte Zweipunktfunktion im Kontinuum übergeht:

$$\tilde{G}(p) \rightarrow \frac{m - ip_\mu\gamma_\mu}{\sum_\mu p_\mu^2 + m^2}, \quad (1.90)$$

die einen Pol bei $p_4 = iE = i\sqrt{\underline{k}^2 + m^2}$ mit korrekter Dispersionsfunktion besitzt. Allerdings läßt sich der $\sin(ap_\mu)$ nicht nur für $ap_\mu \approx (0, 0, 0, 0)$ durch sein Argument ersetzen, sondern auch in allen weiteren 15 Eckbereichen der vierdimensionalen Brillouin-Zone $-\pi < ap_\mu \leq \pi$:

$(\pi, 0, 0, 0), (0, \pi, 0, 0), \dots, (\pi, \pi, 0, 0), (\pi, 0, \pi, 0), \dots, (\pi, \pi, \pi, 0), \dots, (\pi, \pi, \pi, \pi)$
Somit hat der Propagator der naiven Wirkung in allen diesen 15 weiteren Eckbereichen zusätzliche Pole, die Teilchenanregungen mit korrekter Dispersionsrelation im Kontinuums-Limes entsprechen. Das Phänomen der Fermionenverdopplung ist untrennbar mit dem Problem der chiralen Symmetrie auf dem Gitter verknüpft.

Nach dem Nielsen-Ninomiya-Theorem [52, 53] ist es unmöglich eine diskretisierte Version D des Dirac-Operators zu konstruieren, die gleichzeitig folgende Bedingungen erfüllt:

1. $D(x, y)$ ist lokal, d.h. es lassen sich Konstanten c und r_{loc} finden, so daß $|D(x)| \leq c e^{-|x|/r_{\text{loc}}}$ (vgl. Diskussion in Abschnitt 3.4),
2. die Fourier-Transformierte $\tilde{D}(p)$ hat im freien Fall den korrekten Kontinuums-Limes $\tilde{D}(p) = i\gamma_\mu p_\mu + \mathcal{O}(ap^2)$ falls $|p| \ll \pi/a$,
3. $\tilde{D}(p)$ ist im freien Fall für $p \neq 0$ invertierbar, d.h. es tritt keine Fermionenverdopplung ein,
4. D erfüllt die Chiralitätsbedingung (1.37) $\{D, \gamma_5\} = 0$.

(1.91)

In der Vergangenheit wurden verschiedene Wirkungen vorgeschlagen, die in unterschiedlicher Weise mit dem Problem der Fermionenverdopplung umgehen.

1.3.4 Der Wilson-Dirac-Operator

Eine Möglichkeit, die Fermionenverdopplung auf dem Gitter zu vermeiden, geht auf Wilson [54] zurück. Hierbei wird der naiven Wirkung (1.87) ein zusätzlicher im Kontinuums-Limes verschwindender Term

$$-\frac{ra^5}{2} \sum_x \bar{\Psi}(x) \square \Psi(x) \quad (1.92)$$

mit dem meist Eins gesetzten Wilson-Parameter r hinzugefügt, der jedoch die chirale Symmetrie explizit bricht. Unter Verwendung einer symmetrisierten diskreten Version des Laplace-Operators erhält man die Wilson-Wirkung

$$S_W = \frac{1}{2\kappa} a^4 \sum_x \bar{\Psi}(x) D_W(x, y) \Psi(y) \quad (1.93)$$

mit der Wilson-Dirac-Matrix

$$aD_W(x, y; m_W) = \mathbb{1} - \kappa M_W(x, y) \quad (1.94)$$

und der Matrix

$$M_W(x, y) = \sum_{\mu} (r - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta(x + \hat{\mu}, y) + (r + \gamma_{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu}) \delta(x - \hat{\mu}, y) . \quad (1.95)$$

Der dimensionslose Parameter

$$\kappa = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{am_W + 4r} \right) \quad (1.96)$$

wird „Hopping-Parameter“ genannt.

Die Quarkmasse ist durch

$$am_q = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c} \right) \quad (1.97)$$

gegeben, wobei die kritische Kopplung κ_c im freien Fall $\kappa_c = 1/(8r)$ beträgt, im allgemeinen jedoch eine Funktion der Eichfeldkopplung ist und durch Simulationen bestimmt werden muß. Diese aufgrund der expliziten Brechung der chiralen Symmetrie notwendige additive Renormierung der Quarkmasse ist ein großer Nachteil der Wilson-Wirkung.

Der Wilson-Term führt dazu, daß im freien Fall die unerwünschten Pole des naiv diskretisierten Quarkpropagators (1.89) im Impulsraum verschoben werden

$$m \rightarrow m_W + \frac{2r}{a} \sum_{\mu} \sin^2 \left(\frac{p_{\mu} a}{2} \right) . \quad (1.98)$$

Den Dopplerezuständen wird dadurch eine im Kontinuums-Limes divergierende Masse gegeben, so daß diese entkoppeln.

Die Operatoren $D_W(m_W)$ und M_W erfüllen beide die γ_5 -Hermitizität (1.45), sind jedoch nicht normal wie im Kontinuum (1.43). Durch die Multiplikation mit γ_5 kann jedoch ein hermitescher Operator

$$H_W(m_W) = \gamma_5 D_W(m_W) \quad (1.99)$$

konstruiert werden, dessen Eigenwerte folglich reell sind.

Ein großer Nachteil bei der Verwendung von Wilson-Fermionen ist, daß aufgrund reeller Eigenwerte des Wilson-Operators sog. „exzeptionelle Konfigurationen“ auftreten können, die dazu führen, daß Korrelationsfunktionen nicht das erwartete in der Zeit abfallende Verhalten aufweisen (vgl. Abschnitt 9.3). Dies führt bei der Verwendung der unverbesserten Wilson-Eichfeldwirkung zu sehr kleinen Eigenwerten des hermiteschen Operators $H_W(m_W)$, so daß dieser sehr schlecht konditioniert ist. Im Gegensatz zu den $\mathcal{O}(a^2)$ -Diskretisierungsfehlern der naiven Wirkung (1.87) führt der Wilson-Term ferner dazu, daß Gitterartefakte lediglich mit $\mathcal{O}(a)$ verschwinden.

1.3.5 Der Wilson/Clover-Dirac-Operator

Eine Möglichkeit der $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung der Wilson-Wirkung ist die sog. Clover-Wirkung, die auf Sheikholeslami und Wohlert [55] zurückgeht. Hierbei wird die Wilson-Wirkung durch Hinzufügen des sog. Clover-Terms wie folgt modifiziert:

$$S_{SW} = S_W + \frac{a^5 igc_{SW}}{4} \sum_x \bar{\Psi}(x) \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \Psi(x) . \quad (1.100)$$

$F_{\mu\nu}$ ist hierbei eine symmetrisierte Diskretisierung des gluonischen Feldstärketensors und ergibt sich durch Summation über die in Abbildung 1.2 gezeigten Plaquetten. Um die gewünschte $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung zu erreichen, muß der Sheikholeslami-Wohlert Koeffizient jedoch geeignet gewählt werden.

Während Sheikholeslami und Wohlert den Koeffizienten zunächst perturbativ ohne Schleifenkorrekturen bestimmten ($c_{SW} = 1$) [55] und Wohlert später die Berechnung auf die Einschleifennäherung erweiterte ($c_{SW} = 1 + 0.2659 g^2$) [56], wurden v.a. von der ALPHA-Kollaboration die Koeffizienten sowohl für die Valenzquark-Approximation [57, 58] als auch für den dynamischen Fall mit $N_f = 2$ Flavours [59] nichtperturbativ basierend auf dem Schrödinger-Funktional numerisch ermittelt.

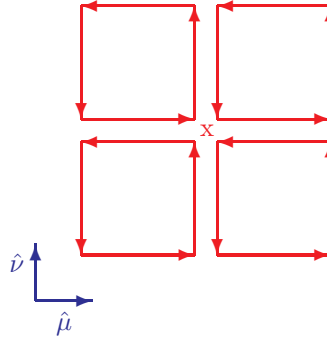


Abbildung 1.2: Graphische Darstellung des Clover-Terms.

1.3.6 Der Overlap-Operator

Da die ersten drei Forderungen des Nielsen-Ninomiya-Theorems (1.91) für die Formulierung einer lokalen Feldtheorie zwingend notwendig sind, wurde das Theorem stets so interpretiert, daß die Realisierung der chiralen Symmetrie auf dem Gitter schlichtweg unmöglich ist. 1997 wurde jedoch von P. Hasenfratz [17] eine Gleichung wiederentdeckt, die bereits 1982 von Ginsparg und Wilson [18] formuliert wurde und den Schlüssel zur Implementierung chiraler Symmetrie auf dem Gitter liefert. Diese sog. Ginsparg-Wilson-Gleichung ersetzt die im Kontinuum die chirale Symmetrie gewährleistende Kommutatorbeziehung (1.37) durch

$$\gamma_5 D + D \gamma_5 = \frac{a}{\rho} D \gamma_5 D . \quad (1.101)$$

Der rechte Term¹ verschwindet im Kontinuums-Limes, auf dem Gitter ist er jedoch notwendig, um die chirale Symmetrie unter modifizierten Transformationen zu realisieren und auch die $U(1)_A$ -Anomalie zu gewährleisten.

Dabei reicht es aus, wenn die fermionische Wirkung lediglich invariant unter folgenden Transformationen ist [60]

$$\begin{aligned} \Psi &\rightarrow e^{i\omega\gamma_5(1-\frac{1}{2}aD)}\Psi \\ \bar{\Psi} &\rightarrow \bar{\Psi}e^{i\omega(1-\frac{1}{2}aD)\gamma_5} , \end{aligned} \quad (1.102)$$

die im Kontinuums-Limes in die chiralen U_A , bzw. bei Multiplikation der

¹Die Formel bleibt gültig, wenn auf der rechten Seite $2aD\gamma_5RD$ mit einer lokalen Funktion der Eichfelder $R(x, y)$ gesetzt wird, die jedoch meist, wie auch in dieser Arbeit, auf $1/(2\rho)\delta_{x,y}$ festgesetzt wird.

Exponenten in (1.102) mit T^a in die U_A^a -Transformationen in Tabelle 1.1 übergehen.

Nach der Entdeckung der Ginsparg-Wilson-Gleichung wurden verschiedene Diskretisierungen des Dirac-Operators gefunden, die diese Gleichung erfüllen und generell als Ginsparg-Wilson-Fermionen bezeichnet werden. Beispiele sind Fixpunkt-Fermionen [17, 61, 62], die bei exakter Behandlung keine Gitterartefakte in der klassischen Eichtheorie haben oder die Domain-Wall-Fermionen [63], die auf einen Vorschlag von Kaplan zurückgehen [64] und die vierdimensionale Raumzeit durch eine weitere Dimension ergänzen. Exakte chirale Symmetrie ist jedoch nur im Limes einer unendlichen fünften Dimension gegeben. Theoretische Überlegungen im Domain-Wall-Formalismus haben schließlich auf das Konzept der von Neuberger eingeführten Overlap-Fermionen [19, 20] geführt, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden.

Ferner sind approximative Lösungen der Ginsparg-Wilson-Gleichung verbreitet, die die chirale Symmetrie nur näherungsweise implementieren. Beispiele sind Domain-Wall-Fermionen mit endlicher fünfter Dimension, der parametrisierte Fixpunkt-Operator [65] oder chiral verbesserte Fermionen [66].

Der masselose Neuberger-Operator ist wie folgt definiert

$$D(0) = \frac{\rho}{a} \left(1 + \frac{D_K}{\sqrt{D_K^\dagger D_K}} \right). \quad (1.103)$$

Für den Kernel-Operator D_K kann im Prinzip jeder beliebige Dirac-Operator verwendet werden, der γ_5 -hermitesch (1.45) ist. Meist wird der Wilson-Operator $D_W(m_W)$ (1.94) mit negativer Masse $am_W = -\rho$ gewählt, wobei der Parameter $\rho \in [0, 2]$ geeignet gewählt werden muß (s. Abschnitt 3.3 und 3.4). In dieser Arbeit verwenden wir $\rho = 1.4$ und den Wilson-Parameter $r = 1$, was nach (1.96) einem Hoppingparameter $\kappa \approx 0.19 > \kappa_c$ entspricht.

Da der Wilson-Operator weit davon entfernt ist, chiral zu sein, bewirkt die Transformation in (1.103) eine starke Modifikation des Kernel-Operators. In [67] wurde vorgeschlagen, als Kernel-Operator allgemeinere bereits annähernd chirale Operatoren, wie z.B. eine trunkierte Version des klassisch perfekten Dirac-Operators zu verwenden. In diesem Fall führt der Overlap-Formalismus nur zu einer geringen Modifikation des Kernel-Operators. Ein Kernel-Operator, der selbst die Ginsparg-Wilson-Gleichung erfüllt, würde durch die Overlap-Konstruktion reproduziert werden. Da der Wilson-Operator jedoch wesentlich einfacher hardwarenah zu optimieren ist, wird dieser auch im Rahmen dieser Arbeit verwendet.

Der massive Overlap-Operator läßt sich einfach aus dem masselosen Neuberger-Operator (1.103) konstruieren:

$$D(m_q) = \left(1 - \frac{am_q}{2\rho}\right) D(0) + m_q. \quad (1.104)$$

Im Rahmen unserer spektralen Untersuchungen werden wir eine verbesserte Version [68, 69] des masselosen Neuberger-Operators verwenden, die wie folgt definiert ist

$$D^{\text{imp}}(0) = \left(1 - \frac{a}{2\rho} D(0)\right)^{-1} D(0). \quad (1.105)$$

Deren massive Version kann wie folgt geschrieben werden [70]

$$D^{\text{imp}}(m_q) = \left(1 - \frac{am_q}{2\rho}\right) \frac{D(m_q)}{1 - \frac{aD(m_q)}{2\rho}} \quad (1.106)$$

$$= D^{\text{imp}}(0) + m_q. \quad (1.107)$$

Zu Konventionen bzgl. der Nomenklatur der Eigenmoden siehe Abschnitt 4.1.

Der Overlap-Operator kann als die theoretisch sauberste Diskretisierung des Kontinuums-Dirac-Operators angesehen werden. Der numerische Aufwand ist jedoch wesentlich größer als etwa bei Simulationen mit Wilson-Fermionen. Auch sind Overlap-Fermionen nicht wie Wilson-Fermionen ultralokal (s. Abschnitt 3.4). Die wesentlichen Vorteile von Overlap-Fermionen, die an verschiedenen Stellen dieser Arbeit von Bedeutung sind, seien an dieser Stelle kurz zusammengefaßt:

- Overlap-Fermionen ermöglichen eine exakte Implementierung der chiralen Symmetrie in Form der Ginsparg-Wilson-Gleichung (1.101) und der chiralen $U(1)_A$ -Anomalie auf dem Gitter.
- Im Gegensatz zu Simulationen mit Wilson-Fermionen treten keine exceptionellen Konfigurationen auf, so daß hadronische Korrelationsfunktionen reguläres Verhalten zeigen (vgl. Abschnitt 9.3) und Simulationen bei sehr kleinen Quarkmassen möglich werden.
- Der Overlap-Operator ist im Gegensatz zum Wilson-Operator automatisch $\mathcal{O}(a)$ -verbessert [71], so daß keine weiteren Terme zur Beseitigung von $\mathcal{O}(a)$ -Effekten hinzugenommen werden müssen.
- Spektrale Eigenschaften des Kontinuums-Operators, wie die exakte Chiralität der Nullmoden und das Auftreten der Nichtnullmoden mit verschwindender Chiralität in komplex konjugierten Paaren, sind auch auf dem Gitter realisiert (vgl. Abschnitt 4.1).

- Auch das Atiyah-Singer-Index-Theorem ist auf dem Gitter realisiert [72] und erlaubt die Bestimmung der topologischen Ladung einer Konfiguration auf fermionischem Wege (vgl. Abschnitt 7.1.2).
- Overlap-Fermionen können als UV-Filter eingesetzt werden, um die physikalisch relevante infrarote Struktur des QCD-Vakuums zu erforschen, ohne daß eine explizite Modifikation (Glättung) der Eichfelder nötig ist.

1.4 Monte-Carlo-Simulationen auf dem Gitter

Zur Berechnung von Vakuumerwartungswerten gluonischer Observable $O(U)$ auf dem Gitter, wird das zu (1.27) analoge Integral

$$\langle O(U) \rangle = \frac{1}{Z_0} \int DU O(U) e^{-S_{\text{eff}}(U)} \quad (1.108)$$

mit der effektiven bosonischen Wirkung

$$S_{\text{eff}}(U) = S_{\text{gauge}}(U) - \ln \det(D(U)) \quad (1.109)$$

als eine Mittelung über ein statistisches Ensemble mit der Boltzmann-Verteilung $e^{-S_{\text{eff}}(U)}$ interpretiert. Derartige statistische Probleme lassen sich durch Monte-Carlo-Statistik lösen. Hierbei erzeugt man in einer Markov-Kette $i = 1, \dots, N$ Eichfeldkonfigurationen $\{U\}^{(i)}$, die im statistischen Gleichgewicht gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_i \propto e^{-S_{\text{eff}}(\{U\}^{(i)})} \quad (1.110)$$

verteilt sind.

Die Verteilung P_i sowie die Übergangswahrscheinlichkeiten p_{ij} zwischen zwei Konfigurationen $\{U\}^{(i)}$ und $\{U\}^{(j)}$ müssen in diesem stochastischen Prozeß folgende Bedingungen erfüllen:

- **Normierung**
Für alle i muß gelten $\sum_j p_{ij} = 1$.
- **Strenge Ergodizität**
Jede einzelne Konfiguration $\{U\}^{(j)}$ muß von jeder anderen Konfiguration mit nichtverschwindender Wahrscheinlichkeit erreichbar sein, d.h. für $p_i, p_j > 0$ muß für ein endliches n gelten $\sum_{i_k} p_{ii_1} \dots p_{i_n j} > 0$.

- **Detailliertes Gleichgewicht**

Die weitere Forderung $P_i p_{ij} = P_j p_{ji}$ ist hinreichend, um die Verteilung (1.110) zu realisieren.

Bei genügend hoher Statistik können die Vakuumerwartungswerte in (1.108) durch einfache Mittelwertbildung („importance sampling“) über alle Eichfeldkonfigurationen $\{U\}^{(i)}$ approximiert werden

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(\{U\}^{(i)}) . \quad (1.111)$$

Das Berechnen der für jede Diskretisierung des Dirac-Operators nichtlokalen Fermiondeterminante in (1.109) ist numerisch äußerst aufwendig – besonders bei der Verwendung von Overlap-Fermionen.

Eine bei Gitterrechnungen weit verbreitete Näherung ist die Valenzquark-Approximation („quenched approximation“) [73, 74], die bei Overlap-Fermionen eine enorme numerische Vereinfachung darstellt. Hierbei wird die Fermiondeterminante gleich Eins gesetzt

$$\ln \det(D(U)) \rightarrow 1 . \quad (1.112)$$

Obwohl dies auch theoretisch eine sehr starke Vereinfachung darstellt, werden wichtige Konzepte der QCD, wie Confinement, asymptotische Freiheit und chirale Symmetriebrechung auch in der Valenzquark-Approximation realisiert. Die Fehler im Vergleich zur dynamischen Theorie liegen in den meisten Fällen bei ca. 10–20% – eine genaue Analyse der systematischen Fehler dieser Approximation ist ohne direkten Vergleich mit dynamischen Simulationsergebnissen jedoch nicht möglich.

Perturbative Untersuchungen haben gezeigt, daß diese Näherung dem Limes unendlicher Seequarkmassen entspricht, in dem keine virtuellen Quark-Antiquark-Paare generiert werden können. Während die Valenzquarks also korrekt behandelt werden, wird der Einfluß der dynamischen Seequarks ignoriert. In dieser Approximation müssen Eichfeldkonfigurationen lediglich gemäß der Verteilung

$$P_i \propto e^{-S_{\text{gauge}}(\{U\}^{(i)})} \quad (1.113)$$

generiert werden.

Mögliche Algorithmen zur Erzeugung der $SU(3)_c$ -Konfigurationen sind der Metropolis-Algorithmus [75] oder der Pseudo-Wärmebad-Algorithmus [76,

77]. Letzterer wurde in Kombination mit zusätzlichen Überrelaxationsschritten [76] verwendet, um die Konfigurationen zu generieren, die im Rahmen dieser Arbeit zur Untersuchung der Vakuum-Struktur bei $T = 0$ Verwendung finden.

Erste Algorithmen zur Simulation mit dynamischen Overlap-Fermionen wurden in den letzten Jahren entwickelt [78, 79, 80, 81, 82, 83, 84] und fangen erst jetzt an, auf kleinen Gittern in numerischen Simulationen Bedeutung zu gewinnen. Ein Review der unterschiedlichen Methoden ist in [85] zu finden.

Simulationen mit dynamischen Wilson-Fermionen sind derzeit auch bei kleinen Quarkmassen auf größeren Gittern technisch möglich [86] geworden. Im Rahmen unserer Untersuchungen der QCD bei endlicher Temperatur werden Konfigurationen verwendet, die von der DIK-Kollaboration mit dem Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus (HMC) [87] unter Verwendung diverser Verbesserungsmethoden [88, 89] bei sehr kleinen Massen generiert wurden. In seiner Grundform ist der HMC-Algorithmus ein exakter Algorithmus, der eine Molekulardynamik-Entwicklung der Eichfelder mit dem Metropolisverfahren [75] zur Korrektur der bei der Integration der Bewegungsgleichungen auftretenden Diskretisierungsfehler verbindet.

Kapitel 2

Modelle zur Beschreibung des QCD-Vakuums

2.1 Semiklassische Modelle

In der semiklassischen Beschreibung der QCD¹ sucht man nach Sattelpunkten der Zustandssumme der QCD, d.h. nach Lösungen, die die klassische euklidische Wirkung (1.20) stationär werden lassen. Um diese Lösungen zu finden, ist es sinnvoll, die gluonische euklidische Wirkung wie folgt zu schreiben:

$$S_{\text{gauge}}^E = \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a = \frac{1}{4} \int d^4x \left[\pm F_{\mu\nu}^a \tilde{F}_{\mu\nu}^a + \frac{1}{2} \left(F_{\mu\nu}^a \mp \tilde{F}_{\mu\nu}^a \right)^2 \right]. \quad (2.1)$$

Hierbei ist

$$\tilde{F}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma} \quad (2.2)$$

der mittels des total antisymmetrischen Tensors $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ definierte duale gluonische Feldstärketensor.

Der erste Term ist proportional zu der wie folgt definierten topologischen Ladung

$$Q = \frac{g^2}{32\pi^2} \int d^4x F_{\mu\nu}^a(x) \tilde{F}_{\mu\nu}^a(x). \quad (2.3)$$

Da diese eine topologische Invariante ist (vgl. Abschnitt 7.1) und der zweite

¹Eine gute Zusammenfassung der Instanton-Physik bietet [90].

Term in (2.1) stets positiv ist, wird die minimale Wirkung

$$S_{\text{inst}} = \frac{8\pi^2}{g^2} |Q| \quad (2.4)$$

durch (anti-)selbstduale Felder

$$F_{\mu\nu}^a = \begin{cases} +\tilde{F}_{\mu\nu}^a & \text{„Instantonen“} \\ -\tilde{F}_{\mu\nu}^a & \text{„Antiinstantonen“} \end{cases} \quad (2.5)$$

angenommen, die als (Anti-)Instantonen bezeichnet werden. Sie sind Lösungen der Bewegungsgleichung der reinen Yang-Mills-Theorie

$$D_{\mu}^{ab} F_{\mu\nu}^b = 0. \quad (2.6)$$

Eine explizite bei $x_{\nu} = 0$ lokalisierte Instanton-Lösung mit Ladung $Q = +1$, die als BPST-Instanton bekannt ist, ist in der sog. regulären Eichung gegeben durch

$$A_{\mu}^a(x) = \frac{2\eta_{a\mu\nu}x_{\nu}}{x^2 + \rho^2}. \quad (2.7)$$

Hierbei charakterisiert ρ die Ausdehnung des Instantons und $\eta_{a\mu\nu}$ ist das wie folgt definierte 't Hooft-Symbol

$$\eta_{a\mu\nu} = \begin{cases} \epsilon_{a\mu\nu} & \mu, \nu = 1, 2, 3 \\ +\delta_{a\mu} & \nu = 4 \\ -\delta_{a\nu} & \mu = 4. \end{cases} \quad (2.8)$$

Der Ausdruck für ein Antiinstanton mit $Q = -1$ folgt durch den Austausch des Vorzeichens in den beiden δ Symbolen obiger Definition von $\eta_{a\mu\nu}$.

Ein $SU(N)_c$ -Instanton wird durch $4N$ sog. kollektive Koordinaten beschrieben, für die Gruppe $SU(3)_c$ sind es die Position z_{ν} (4 Koordinaten), die Ausdehnung ρ (1 Koordinate), und die Farborientierung (7 Koordinaten). $SU(3)_c$ -Instantonen können durch Einbetten von $SU(2)_c$ -Instantonen konstruiert werden.

Das Quadrat des korrespondierenden gluonischen Feldstärketensors ist gegeben durch

$$(F_{\mu\nu}^a(x))^2 = \frac{192\rho^4}{(x^2 + \rho^2)^4}. \quad (2.9)$$

Daraus ist ersichtlich, daß Instantonen im vierdimensionalen euklidischen Raum als sphärische stark lokalisierte Felder mit gluonischer Feldstärke $F_{\mu\nu}^a(x) \propto x^{-4}$ (Dipol-Feld) in Erscheinung treten.

Im Minkowski-Raum sind sie allerdings im Gegensatz zu Solitonen keine physikalischen Objekte, sondern Tunnelereignisse zwischen verschiedenen topologisch unterschiedlichen Vakua $|n\rangle$ mit einer Tunnelwahrscheinlichkeit $P \propto e^{-S_{\text{inst}}}$. Der Grundzustand der QCD ist hierbei die als θ -Vakuum bezeichnete Superposition aller durch die sog. Chern-Simons-Nummer n charakterisierten Vakua

$$|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta} |n\rangle. \quad (2.10)$$

Der Vakuumwinkel $\theta \leq 10^{-9}$ wird hierbei vor allem durch Messungen des elektrischen Dipolmoments des Neutrons beschränkt und ist evtl. Null. Bei nicht verschwindendem Wert muß der Lagrange-Dichte ein Term $\mathcal{L}_\theta = i\theta Q$ hinzugefügt werden, der die P-, T- und CP-Invarianz der starken Wechselwirkung brechen würde. Die Frage, ob θ einen kleinen nichtverschwindenden Wert annimmt ist als „starkes CP-Problem“ bekannt und bis heute nicht geklärt.

Eines der größten Erfolge des Instanton-Modells ist 't Hoofts Lösung des $U(1)_A$ -Problems. Hierbei sind Instantonen verantwortlich dafür, daß der Axialvektorstrom (vgl. Tabelle 1.1)

$$\int d^4x \partial_\mu A_\mu = 2N_f(N_0^- - N_0^+) = 2N_f Q \quad (2.11)$$

nicht erhalten bleibt, wenn die Anzahl N_0^+ der Nullmoden mit positiver und die Anzahl N_0^- derer mit negativer Chiralität nicht identisch ist.

Die entscheidende Erkenntnis in 't Hoofts Herleitung ist es, daß der Dirac-Operator im Feld eines Instantons eine Nullmode besitzt. In der singulären Eichung ist diese Nullmode gegeben durch

$$|\psi_0(x)\rangle = \frac{\rho}{\pi} \frac{1}{(x^2 + \rho^2)^{3/2}} \frac{\sum_\mu \gamma_\mu x_\mu}{\sqrt{x^2}} P_+ |\phi\rangle, \quad (2.12)$$

wobei $|\phi\rangle$ ein konstanter Spinor mit Spin- und Colour-Index ist.

Hieraus ist ersichtlich, daß die Nullmode im Feld eines Instantons negative Chiralität besitzt. Analog gilt, daß im Feld eines Antiinstantons eine Nullmode mit positiver Chiralität auftritt. Für allgemeine Felder erwartet man, daß Gebiete höherer (Anti-)Selbstdualität entsprechend erhöhte lokale Chiralität der Moden induzieren.

Basierend auf diesen Überlegungen wurde von Shuryak, Diakonov und Petrov [90, 91, 92] das verdünnte Instanton-Flüssigkeitsmodell (Instanton Liquid Modell (ILM)) eingeführt. Die Hauptannahme dieses Modells ist es, daß

Instantonen mit sehr großer Feldstärke eine Flüssigkeit bilden, die durch die mittlere Dichte der Instantonen $n \approx 1 \text{ fm}^{-4}$ und ihre mittlere Größe $\rho \approx 1/3 \text{ fm}$ charakterisiert werden. Aus diesen Parametern folgt, daß der Anteil der Raumzeit, der durch Instantonen erfüllt ist, $f \approx n\rho^4 \approx 1\%$, sehr klein ist und die semiklassische Näherung durchführbar ist. Eine typische Vakuum-Konfiguration sollte nach diesem Modell demnach sehr inhomogen sein und aus wenigen stark lokalisierten (Anti-)Instantonen mit sehr großer Feldstärke bestehen, die von Regionen sehr schwacher Felder umgeben sind.

Das Phänomen der chiralen Symmetriebrechung läßt sich im Instanton-Modell als ein Mischungsszenario von Instantonen und Antiinstantonen beschreiben und soll im Folgenden kurz bildhaft skizziert werden. Wie oben erläutert, induziert ein einzelnes Instanton bzw. Antiinstanton eine Nullmode des Dirac-Operators mit negativer bzw. positiver Chiralität. Ein Instanton/Antiinstanton-Paar, dessen Entfernung weit größer als der typische Instanton-Radius ist, führt zu einem Paar zweier Nullmoden entgegengesetzter Chiralität. Sobald die Fermion-Wellenfunktionen sich jedoch überlappen, beginnen sie sich zu vermischen und die Entartung der Moden wird aufgehoben, so daß der Dirac-Operator ein Paar von kleinen komplex konjugierten Eigenmoden annimmt. Werden mehr und mehr (Anti-)Instantonen dem System hinzugefügt, bilden diese eine nicht verschwindende spektrale Dichte nahe des Ursprungs, die nach der Banks-Casher-Relation zu einem nichtverschwindenden chiralen Kondensat führt.

Während die Nullmoden für ein unendlich entferntes Instanton/Antiinstanton-Paar exakt chiral sind, nimmt bei der Überlappung der Felder die lokale Chiralität ab. Allerdings sollte für niedrig liegende Moden auch bei der Überlappung in der Nähe des Peaks des Instantons bzw. Antiinstantons eine erhöhte negative bzw. positive Chiralität der Moden feststellbar sein, obwohl die globale Chiralität der niedrig liegenden Nichtnullmoden verschwindet.

Dieses Bild agiert als Prototyp für viele andere semiklassisch motivierte Modelle des QCD-Vakuums, wie etwa dem Caloron-Gasmodell [93]. Stets wird angenommen, daß das Spektrum der niedrigsten Moden durch lineare Superposition korrespondierender Nullmoden aufgebaut wird. Allerdings zerstört die Wechselwirkung mehrerer Instantonen auch die Eigenschaft der Instantonen, Lösungen der klassischen Feldgleichungen zu sein. Demnach ist a priori nicht klar, inwieweit dieses Szenario der chiralen Symmetrie-Brechung realistisch ist.

2.2 Niedrigdimensionale Vakuundefekte

Starke Kritik am Instanton-Modell wurde von Witten bereits 1978 in [94, 95] formuliert. Hierin wird aufgezeigt, daß Instanton-Lösungen im Konflikt mit Vorhersagen chiraler Dynamik im Limes großer Anzahl von Farben N sind. Instantonen würden zu einer Masse des η' führen, die in diesem Limes exponentiell verschwindet, während Überlegungen basierend auf chiraler Dynamik eine Masse der Größe $1/N$ nahelegen. Evtl. überleben Instantonen auch gar nicht den Übergang von der semiklassischen Approximation in die Quantentheorie oder sind nur eine kleine Untermenge viel wesentlicherer topologischer Fluktuationen.

Ein anderes Argument, das stark gegen die Dominanz von Instantonen im Funktionalintegral der QCD spricht, ist die Entdeckung der von uns im Kapitel 7 diskutierten dreidimensionalen globalen Struktur der vollen topologischen Ladungsdichte. Diese erstmals von Horváth *et al.* [23] aufgezeigte Vorzeichen-kohärente Struktur [96] ist unvereinbar mit der für semiklassische Lösungen typischen vierdimensionalen Ausdehnung.

Ein weiterer Kritikpunkt beruht darauf, daß Simulationen im Instanton-Modell gezeigt haben [97], daß Instantonen das Phänomen des Confinements der Quarks nicht erklären können. Um dieses Phänomen zu erklären, wurde nach niedrigdimensionaleren Strukturen gesucht, die mit UV-Fluktuationen in Verbindung stehen. Vielversprechende Kandidaten sind zweidimensionale Vortex-Flächen und eindimensionale magnetische Monopol-Linien. Diese Objekte sind jedoch auf dem Gitter recht algorithmisch definiert – nach einer Fixierung der Eichung muß eine Projektion in das Zentrum bzw. auf abelsche Untergruppen der nichtabelschen $SU(3)_c$ -Gruppe durchgeführt werden. Neue Untersuchungen haben gezeigt, daß Monopole und Vortizes korreliert sind. Das Entfernen einer Sorte dieser Objekte zerstört den Confinement-Mechanismus der anderen [98]. Monopole und Vortizes geben jedoch nicht nur einen Ansatzpunkt zur Erklärung des Confinements, sondern sind auch wesentlich, um die chirale Symmetrie zu brechen. Entfernt man diese Objekte aus einer Eichfeldkonfiguration, so verschwindet die Topologie und die chirale Symmetrie wird restauriert [98, 99, 100]. Ein weiterer Zusammenhang wird bei endlicher Temperatur deutlich. Hier dissoziieren große Instantonen (bei endlicher Temperatur „Caloronen“ genannt) in statische magnetische Monopole [101], die als Konstituenten der Caloronen angesehen werden können.

Die Verbindung der Confinement verursachenden Fluktuationen zur Kontinuums-Theorie bleibt unklar. In [102] wird versucht, diese Fluktuationen als

niedrigdimensionale ($d < 4$) Vakuumdefekte zu beschreiben. Dieser Versuch basiert auf der Entdeckung, daß Vortizes und Monopole mit UV-divergenter abelscher Wirkung assoziiert sind. Die von uns in Kapitel 7 diskutierte volle topologische Ladungsdichte zeigt eine singuläre Struktur, die deutlich korreliert mit niedrigdimensionalen Defekten wie Monopolen und Vortizes ist [W9]. Auf diese interessante Verbindung soll jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht näher eingegangen werden.

2.3 Parallelen zum Anderson-Modell

Ein anderes Modell der chiralen Symmetriebrechung [103, 104, 105] geht von der hypothetischen Analogie zwischen dem Instanton-Modell der QCD und dem Anderson-Modell [106] der Festkörperphysik aus. In $d \geq 3$ Dimensionen ereignet sich in einem ungeordneten elektronischen System mit steigender Unordnung ein Übergang von einer metallischen Phase mit delokalisierten, ausgedehnten Zuständen zu einer nichtleitenden Phase mit lokalisierten Zuständen.

Das Phänomen der Leitfähigkeit in einem ungeordneten System wird in diesem Modell dadurch erklärt, daß zunächst an Störstellen gebundene lokalisierte Elektronen durch Überlappung mit benachbarten Störstellen delokalisiert werden können. Ähnlich erklärt das Instanton-Modell das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung dadurch, daß die Nullmoden zunächst an Instantonen gebunden sind, aber durch Überlappung mit benachbarten Instantonen delokalisiert werden und ein nicht verschwindendes chirales Kondensat aufbauen.

Die metallischen Phase mit delokalisierten stark überlappenden Eigenfunktionen kann durch die Wigner-Dyson-Statistik der Zufallsmatrixtheorie beschrieben werden, die das Phänomen der Energieniveau-Abstoßung implementiert, während die nichtleitende Phase mit lokalisierten komplett unkorrelierten Eigenfunktionen durch Poisson-Statistik charakterisiert wird. Diese beiden Phasen trennt ein kritischer Bereich („mobility edge“), der durch kritische Statistik und multifraktale Eigenmoden gekennzeichnet ist [107, 108]. Unsere Untersuchungen bei $T = 0$ deuten an, daß der ganze von uns betrachtete Spektralbereich kritisch ist. Im Rahmen dieser Arbeit werden wir in Abschnitt 5.2 daher lediglich das Konzept der Multifraktalität aufgreifen.

Kapitel 3

Simulationsdetails und Analysewerkzeuge

3.1 Simulationsparameter

Unsere Simulationen bei $T = 0$ wurden auf Konfigurationen durchgeführt, die mit der Lüscher-Weisz-Wirkung (1.82) generiert wurden. Einige der Ensembles wurden bereits in früheren Arbeiten der QCDSF-Kollaboration im Rahmen von Overlap-Rechnungen verwendet [109, 110, 111, 112, 113, 114, 115] andere wurden eigens für unsere Analysen generiert.

Die genauen Simulationsparameter sind der Tabelle 3.1 zu entnehmen. Zur Untersuchung der Volumen-Abhängigkeit diverser Größen wurden drei verschiedene Volumina $12^3 \times 24$, $16^3 \times 32$ und $24^3 \times 48$ bei festem $\beta = 8.45$ verwendet. Zur Betrachtung der a -Abhängigkeit dienen zwei rauhere Ensembles. Zum einen ein $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ mit einem physikalischen Volumen, das näherungsweise dem des $16^3 \times 32$ -Gitters bei $\beta = 8.45$ entspricht. Zum anderen ein $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.00$, dessen physikalisches Volumen vergleichbar mit dem des $24^3 \times 48$ -Gitters bei $\beta = 8.45$ ist. Die beiden Konfigurationen auf dem sehr feinen $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.60$ werden lediglich in Abschnitt 7.3.1 und 7.4 behandelt.

Die in Tabelle 3.1 angegebenen Gitterabstände wurden berechnet, indem die Zerfallskonstante des Pions zur Bestimmung der Skala verwendet wurde (s. Abschnitt 3.5). Die in der Tabelle ebenso angegebene topologische Suszeptibilität wird in Abschnitt 7.1.8 diskutiert.

β	a [fm]	$L_s^3 \times L_t$	aL_s [fm]	V [fm ⁴]	χ_{top}	# Konfig.
8.60	0.096(1)	$16^3 \times 32$	1.5	11	–	2
8.45	0.105(2)	$12^3 \times 24$	1.3	5	$[167(3)\text{MeV}]^4$	437
8.45	0.105(2)	$16^3 \times 32$	1.7	16	$[169(3)\text{MeV}]^4$	400
8.45	0.105(2)	$24^3 \times 48$	2.5	81	$[168(4)\text{MeV}]^4$	250
8.10	0.142(2)	$12^3 \times 24$	1.7	15	$[171(1)\text{MeV}]^4$	251
8.00	0.157(3)	$16^3 \times 32$	2.5	74	$[172(4)\text{MeV}]^4$	2156

Tabelle 3.1: Parameter der für die Untersuchungen bei $T = 0$ verwendeten Ensembles in der Valenzquark-Näherung. Aufgelistet sind die Kopplung β , der mit der Pion-Zerfallskonstante bestimmte Gitterabstand a , das Gittervolumen $V_{\text{lat}} = L_s^3 \times L_t$, die physikalische Gitterausdehnung in räumlicher Richtung aL_s und das physikalische Volumen V , ferner die topologische Suszeptibilität χ_{top} sowie die Anzahl der Konfigurationen.

3.2 Implementierung der Signumsfunktion

Zur Berechnung von D_N ist es vorteilhaft, den hermiteschen Wilson-Operator H_W (1.99) zu verwenden, so daß für die Signumsfunktion des Overlap-Operators

$$\text{sgn}(D_W) = \frac{D_W}{\sqrt{D_W^\dagger D_W}} \equiv \gamma_5 \text{sgn}(H_W), \quad H_W = \gamma_5 D_W \quad (3.1)$$

gilt.

Es existieren verschiedene Verfahren [116], die Signumsfunktion (3.1) zu approximieren.

Die Genauigkeit dieser Approximationen kann stark verbessert werden, indem die niedrigsten Moden $|\psi_i^W\rangle$ des hermiteschen Wilson-Operators H_W herausprojiziert und exakt behandelt werden. Hierzu definieren wir den Projektor $\mathbb{P}^N = \sum_{i=1}^N |\psi_i^W\rangle\langle\psi_i^W|$ auf den von den niedrigsten N Eigenmoden des Wilson-Operators aufgespannten Unterraum sowie den Projektor $\mathbb{P}_\perp^N = \mathbb{1} - \mathbb{P}^N$ auf den restlichen dazu orthogonalen Raum. In der wie folgt aufge-

spalteten Signumsfunktion

$$\text{sgn}(H_W) = \sum_{i=1}^N \text{sgn}(\lambda_i^W) |\psi_i^W\rangle \langle \psi_i^W| + \mathbb{P}_\perp^N \text{sgn}(H_W) \quad (3.2)$$

wird der erste Term exakt in dem Eigenraum der N niedrigsten Eigenmoden behandelt, während wir für die Approximation des zweiten Terms Minmax-Polynome [117] benutzen.

Für eine gegebene Genauigkeit ϵ wird hierbei ein Polynom $P_{\text{minmax}}(x)$ konstruiert, für das

$$\left| P_{\text{minmax}}(x) - \frac{1}{\sqrt{x}} \right| < \epsilon \quad \text{für} \quad (\lambda_{N+1}^W)^2 < x < (\lambda_{\text{max}}^W)^2 \quad (3.3)$$

gilt, so daß die Signumsfunktion insgesamt durch

$$\text{sgn}(H_W) = \sum_{i=1}^N \text{sgn}(\lambda_i^W) |\psi_i^W\rangle \langle \psi_i^W| + \mathbb{P}_\perp^N H_W P_{\text{minmax}}(H_W^2) \quad (3.4)$$

gegeben wird. P_{minmax} wird als Summe von Chebychev-Polynomen entwickelt, wobei die Koeffizienten dieser Entwicklung durch den Austausch-Algorithmus von Maehly [117] bestimmt werden.

3.3 Konditionierung des Wilson-Operators

Der Grad n des Polynoms, der in dieser Darstellung nötig ist, um die Genauigkeit ϵ zu erhalten, ist bei Herausprojektion von $N - 1$ Wilson-Moden näherungsweise durch

$$n = \frac{1}{b} \kappa_N(H_W) \log\left(\frac{A}{\epsilon}\right) \quad (3.5)$$

gegeben mit den Koeffizienten $A = 0.41$ und $b = 2.1$ [117].

Hierbei ist

$$\kappa_N(H_W) = \frac{\lambda_{\text{max}}^W}{\lambda_N^W} \quad (3.6)$$

die Konditionszahl des Wilson-Operators in dem zu dem Eigenraum der niedrigsten $N - 1$ Moden orthogonalen Raum.

Abbildung 3.1 zeigt diese Konditionszahl für $N = 1, \dots, 50$ auf dem $24^3 \times 48$ -Gitter. Durch die Projektion von 10 Moden kann die recht hohe Konditionszahl $\kappa_1(H_W)$ (keine Projektion) bereits stark verkleinert werden. Wie die

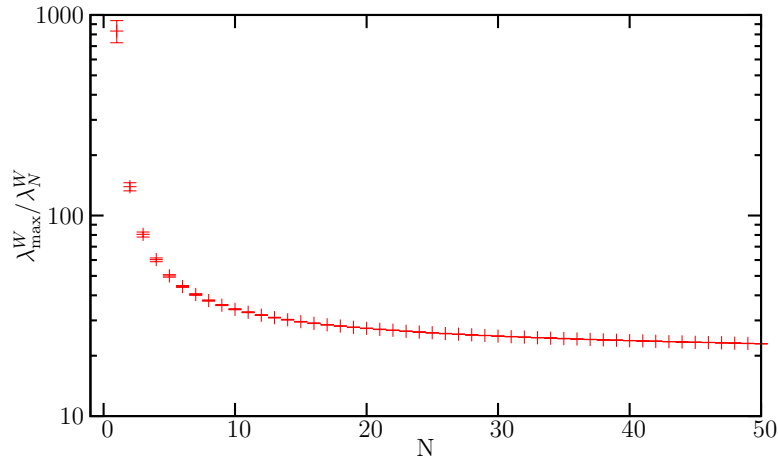


Abbildung 3.1: Verhältnis $|\lambda_{\max}^W / \lambda_N^W|$ der Eigenwerte des hermiteschen Wilson-Operators H_W , gleichbedeutend mit der Konditionszahl $\kappa_N(H_W(-\rho/a))$ des hermiteschen Dirac-Operators auf dem $24^3 \times 48$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Als ρ -Parameter wurde 1.4 verwendet.

Daten auf dem $24^3 \times 48$ -Gitter zeigen, führt die Projektion von noch mehr Moden nur zu einem sehr geringen Abfall der Konditionszahl. Im Rahmen dieser Arbeit wurden daher meist 10–50 Wilson-Moden herausprojiziert.

Die Konditionszahl hängt einerseits von der verwendeten Eichfeldwirkung ab. So ist die Konditionszahl auf Lüscher-Weisz-Konfigurationen um etwa einen Faktor 3 kleiner als auf entsprechenden Wilson-Konfigurationen [109], da durch die Unterdrückung von Dislokationen auch (unphysikalische) Nullmoden und kleine Eigenmoden des Wilson-Operators stark reduziert werden. Wie Abbildung 3.2 zeigt, hängt die Konditionierung andererseits auch von dem ρ -Parameter ab. Das Minimum der Konditionszahl wird etwa bei $\rho = 1.6$ erreicht.

Eine möglichst geringe Konditionszahl ist jedoch nicht das einzige Kriterium bei der Wahl des ρ -Parameters. Möglichst gute Lokalisierungseigenschaften des Overlap-Operators sollen als weiteres Kriterium im folgenden Kapitel betrachtet werden.

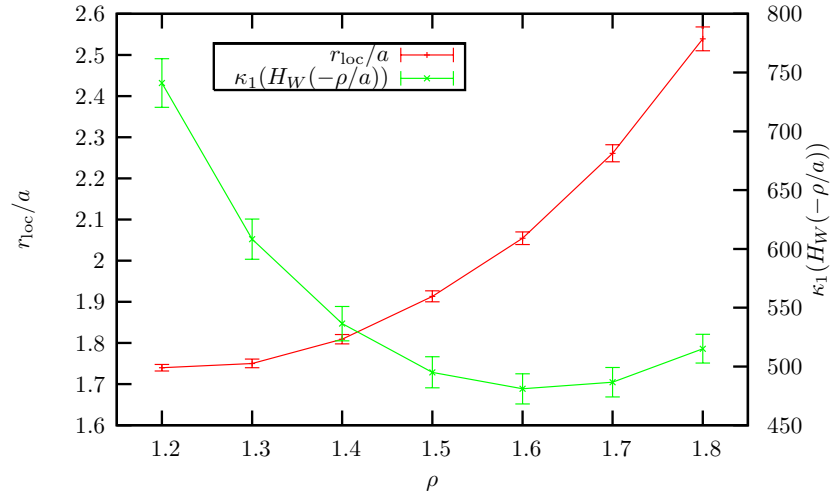


Abbildung 3.2: Vergleich der Konditionszahl $\kappa_1(H_W(-\rho/a))$ des hermiteschen Wilson-Operators mit dem Lokalisierungsradius r_{loc}/a in Abhängigkeit des ρ -Parameters auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. r_{loc}/a wurde durch Fitten der Daten in Abbildung 3.3 bestimmt.

3.4 Lokalität des Overlap-Operators

Lokalität ist eine sehr wichtige Eigenschaft der verwendeten Wirkung, da die Universalität des Kontinuums-Limes, d.h. die Unabhängigkeit dieses Limes von den Details der Diskretisierung, abhängig von den Lokalisierungseigenschaften ist. Die meisten Gitterwirkungen, wie die Wilson-Fermionwirkung, sind ultralokal, d.h. es existiert ein endliches r_{max} , so daß die effektive Reichweite

$$F(r) = \left\langle \left\langle \max_x |D(x, y)| \Big|_{|x-y|_1=r} \right\rangle_y \right\rangle_U \quad (3.7)$$

exakt für alle $r > r_{\text{max}}$ verschwindet.

Die inverse Wurzel in der Definition des Overlap-Operators führt jedoch dazu, daß dieser nicht mehr in diesem strikten Sinne lokal ist. Es konnte allgemein bewiesen werden [118, 119], daß Diskretisierungen des Dirac-Operators, die der Ginsparg-Wilson-Gleichung genügen, nicht ultralokal sind.

Um die Universalität des Kontinuums-Limes zu gewährleisten, ist jedoch eine abgeschwächtere Form von Lokalität ausreichend. Hierbei fordert man

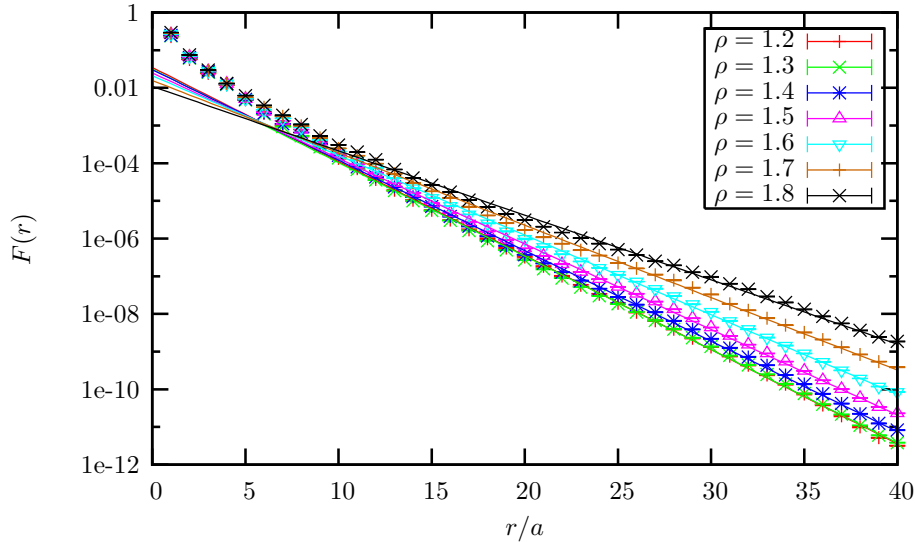


Abbildung 3.3: Effektive Reichweite des Overlap-Operators $F(r)$ als Funktion des Abstandes r/a für $\rho = 1.2, \dots, 1.8$ auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Eingezeichnet sind ferner exponentielle Fits der Daten.

lediglich, daß die effektive Reichweite (3.7) exponentiell gemäß

$$F(r) \propto e^{-r/r_{\text{loc}}} \quad (3.8)$$

abfällt und der Lokalisierungsradius r_{loc} im Kontinuums-Limes gegen Null geht.

Ein rigoroser Beweis dieser abgeschwächten Form von Lokalität läßt sich nur im Falle glatter Eichfelder führen [120], die für alle Plaquetten U_P die Bedingung

$$\|1 - U_P\| < \epsilon \quad \text{mit } \epsilon < \frac{1}{30} \quad (3.9)$$

erfüllen. Im Falle der heute in numerischen Simulationen verwendeten Eichfeldwirkungen ist diese Bedingung nur im freien Fall gegeben, so daß die Lokalisierungseigenschaften numerisch untersucht werden müssen.

Hierzu betrachten wir [120] folgend die effektive Reichweite des masselosen Overlap-Operators $D(0)$ als Funktion des Abstandes in der 1-Norm $|x - y|_1 = \sum_{\mu} |x_{\mu} - y_{\mu}|$. Abbildung 3.3 zeigt die effektive Reichweite für unterschiedliche Werte des ρ -Parameters auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ in Abhängigkeit des Abstandes r/a . In jedem Fall erkennt man einen exponentiellen Abfall für größere Abstände. Dieser Abfall erweist sich als nahezu unabhängig von β .

Der Overlap-Operator hat somit eine Reichweite, die sich zusammen mit dem physikalischen Gitterabstand a beim Übergang zum Kontinuums-Limes verkleinert. Dies entspricht genau der geforderten abgeschwächten Form von Lokalität, die dennoch die Universalität des Kontinuums-Limes gewährleistet.

Die durch exponentielle Fits an Gleichung (3.8) bestimmten Lokalisierungsradien r_{loc}/a sind in Abbildung 3.2 mit eingezeichnet und lassen erkennen, daß sich die Lokalisierungseigenschaften mit abnehmenden Wert von ρ verbessern. Da sich die Konditionierung des Wilson-Operators genau entgegengesetzt dazu verbessert, ist bei der Wahl des ρ -Parameters ein Kompromiß zwischen Lokalisierungseigenschaften des Overlap-Operators und Konditionierung des Wilson-Operators zu treffen. Im Rahmen dieser Arbeit haben wir uns für $\rho = 1.4$ entschieden.

3.5 Bestimmung der physikalischen Skala

In der QCD wird die physikalische Skala dynamisch generiert. Zur Bestimmung des physikalischen Gitterabstandes wird für eine physikalische Observable P der Massendimension d , deren experimenteller Wert P_{exp} möglichst genau bekannt ist, der dimensionslose Wert $\hat{P} = a^d P$ auf dem Gitter bestimmt. Der Gitterabstand ergibt sich dann als

$$a = \left(\hat{P} / P_{\text{exp}} \right)^{1/d}. \quad (3.10)$$

Damit die von der Kopplung $g(a)$ und vom Gitterabstand a abhängige Observable $P(g(a), a)$ für kleine Gitterabstände nahezu unabhängig von a wird, muß gelten:

$$\begin{aligned} a \frac{d}{da} P(g(a), a) &= \mathcal{O}(a^n) \\ \left(a \frac{\partial}{\partial a} - \beta(g) \frac{\partial}{\partial g} \right) P &= \mathcal{O}(a^n). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Diese als Renormierungsgruppengleichung bezeichnete Gleichung beschreibt das asymptotische Skalierungsverhalten (sog. „scaling“) der Observable $P(g(a), a)$. Bedingt durch Gitter-Artefakte treten (auf der rechten Seite der Gleichung) dieses Skalierungsverhalten brechende Terme $\mathcal{O}(a^n)$ auf, die im Kontinuums-Limes mit einer von der Observablen P abhängigen Potenz n des Gitterabstandes verschwinden.

In der Renormierungsgruppengleichung (3.11) tritt die Callan-Symanzik- β -Funktion

$$\beta(g) = -a \left(\frac{\partial g}{\partial a} \right) \quad (3.12)$$

auf.

Sie beschreibt die Bewegung im Parameterraum entlang der Linien konstanter renormierter Kopplung. Diese Gleichung kann im Rahmen der Gitter-Störungstheorie unter Vernachlässigung der das asymptotische Skalierungsverhalten brechenden Terme gelöst werden und liefert

$$\beta(g) = -\beta_0 g^3 - \beta_1 g^5 + \mathcal{O}(g^7). \quad (3.13)$$

Die ersten beiden Koeffizienten der β -Funktion sind universell und lauten für die $SU(3)_c$ -Gruppe ohne dynamische Flavours $\beta_0 = 11/(4\pi)^2$ und $\beta_1 = 102/(4\pi)^4$.

Die perturbative Entwicklung der β -Funktion zeigt, daß die unrenormierte Kopplung $g = 0$ in der QCD ein ultravioletter Fixpunkt ist. Es können demnach im Limes $g \rightarrow 0$ verschiedene Werte der renormierten Kopplung g_R realisiert werden. Wäre $g = 0$ hingegen ein infraroter Fixpunkt, so würde die renormierte Kopplung im Kontinuums-Limes komplett verschwinden und zu einer nicht-interaktiven Feldtheorie führen.

Durch Integration der β -Funktion (3.12) ergibt sich ein direkter Zusammenhang zwischen Gitterabstand und Kopplung

$$a = \Lambda^{-1} e^{-1/(2\beta_0 g^2)} (\beta_0 g^2)^{-\beta_1/(2\beta_0^2)} (1 + \mathcal{O}(g^2)) . \quad (3.14)$$

Die dimensionsbehaftete von g unabhängige Integrationskonstante, der sog. „(Gitter-)Lambda-Parameter“ Λ , führt eine den Kontinuums-Limes überlebende Massenskala in die sonst skaleninvariante nichtabelsche Eichtheorie ein. Diese Einführung einer Skala allein durch den Prozeß der Renormierung wird als „dimensionale Transmutation“ bezeichnet.

Eine gängige Methode, die Skala festzulegen, beruht auf der Berechnung des statischen Quark-Antiquark-Potentials und des Sommer-Parameters r_0 . Dieser Parameter mißt den Abstand zwischen einem Quarkpaar, bei dem die Kraft $F(r_0)$ gegeben ist durch

$$r_0^2 F(r_0) = 1.65 . \quad (3.15)$$

Der Wert 1.65 ist hierbei so gewählt, daß in phänomenologischen Potentialmodellen der QCD etwa $r_0 \approx 0.5$ fm gilt. Auf dem Gitter kann das statische Quarkpotential über das Verhalten von Wilson-Loops bei großen zeitlichen Abständen via

$$V(r) = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln W(r, t) \quad (3.16)$$

definiert werden. Hierbei ist der Wilson-Loop

$$W(r, t) = \langle \text{Tr} \prod_{\mu \in \mathcal{C}_{r,t}} U_\mu \rangle \propto C e^{-tV(r)} \quad (3.17)$$

die Spur des Produkts der Links U_μ entlang rechteckiger Loops $\mathcal{C}_{r,t}$ der Seitenlänge r und t .

Die Kraft $F(r)$ kann nun entweder durch numerische Differentiation von (3.16) oder durch Fitten der folgenden Parametrisierung des Potentials

$$V(r) = C - A/r + \sigma r \quad (3.18)$$

berechnet werden.

Während A den Coulomb-ähnlichen Teil des Potentials bei kleinen Abständen beschreibt, parametrisiert die sog. „Stringtension“ σ den asymptotisch linearen Verlauf des Potentials

$$V(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sigma r . \quad (3.19)$$

In [51] wurde r_0/a für sechs Werte der Kopplung β der Lüscher-Weisz-Wirkung basierend auf einem Fit an Gleichung (3.18) bestimmt. Um die gemessenen Werte interpolieren zu können, wurde basierend auf der führenden Ordnung von (3.14) folgender polynomialer Ansatz gewählt

$$\ln(a/r_0) = -1.55354 - 0.79840 (\beta - 8.3) + 0.09533 (\beta - 8.3)^2 . \quad (3.20)$$

Es ist numerisch vorteilhaft, die β -Werte um 8.3 zu verschieben, so daß der Ursprung im Bereich der betrachteten β -Werte liegt.

Bei der Berechnung von hadronischen Observablen ist es vorteilhaft [70], die Skala über die pseudoskalare Zerfallskonstante f_{PS} zu bestimmen. Da f_{PS} für degenerierte Quarkmassen eine analytische Funktion in m_{PS}^2 ist, wird erwartet, daß f_{PS} gut in den chiralen Limes extrapoliert werden kann. Der Gitterabstand wird berechnet, indem bei der physikalischen Pionmasse f_{PS} gleich der physikalischen Pionzerfallskonstante $f_\pi = 92.4 \text{ MeV}$ [16] gesetzt wird. Der Gitterabstand wurde von der QCDSF-Kollaboration in [70] nur für $\beta = 8.00$ und $\beta = 8.45$ mittels der Pionzerfallskonstante bestimmt. Zur Interpolation übernehmen wir die universellen Koeffizienten des linearen und quadratischen Terms in $(\beta - 8.3)$ aus (3.20) und bestimmen den konstanten Term $c = 2.88 \pm 0.02$ durch Fitten von

$$\ln(f_\pi a) = c - 0.79840 (\beta - 8.3) + 0.09533 (\beta - 8.3)^2 . \quad (3.21)$$

In Abb. 3.4 zeigen wir einen Vergleich der basierend auf $r_0 = 0.5 \text{ fm}$ [51] bzw. $f_\pi = 92.4 \text{ MeV}$ [70] ermittelten Gitterabstände in Abhängigkeit von β zusammen mit den interpolierenden Funktionen (3.20) bzw. (3.21).

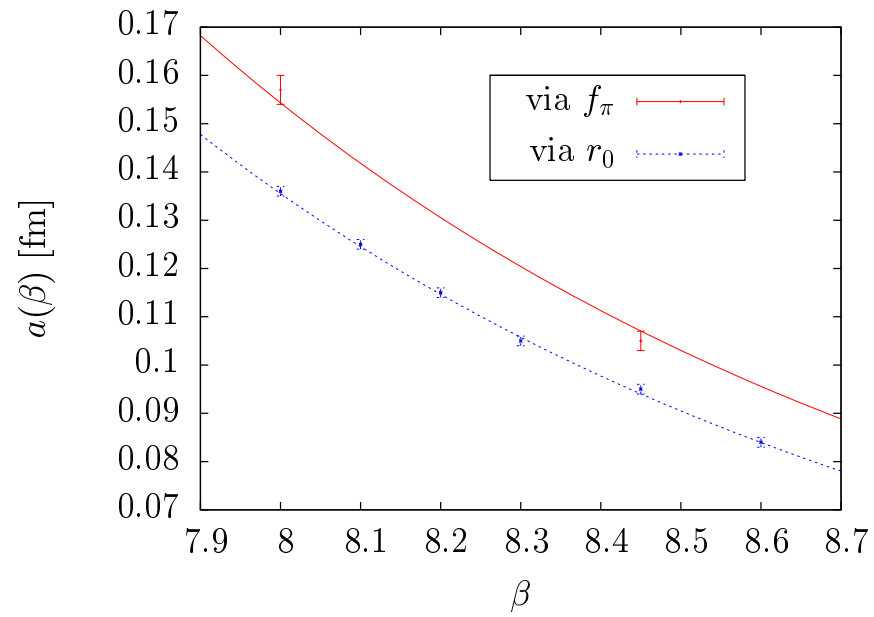


Abbildung 3.4: Vergleich der basierend auf $r_0 = 0.5$ fm [51] bzw. $f_\pi = 92.4$ MeV [70] ermittelten Gitterabstände zusammen mit den interpolierenden Funktionen (3.20) bzw. (3.21).

3.6 Analysewerkzeuge

3.6.1 Clusteranalyse

Zur Beschreibung verschiedener Dichten wird im Rahmen dieser Arbeit mehrfach eine Clusteranalyse durchgeführt. Hierunter versteht man generell ein strukturentdeckendes Analyseverfahren zur Ermittlung von Gruppen (Clustern) von Objekten, deren Eigenschaften bestimmte Ähnlichkeiten aufweisen. Speziell in unserem Fall werden folgende Dichten einer Clusteranalyse unterzogen: die auf Eins normierte skalare Dichte der Moden $p(x) \in [0, 1]$, unterschiedlich definierte Varianten der topologischen Ladungsdichte $q(x) \in \mathbb{R}$ und die lokale Selbstdualität $R(x) \in [-1, 1]$ der Moden. An dieser Stelle soll das Auffinden der Cluster einer beliebigen Dichte $D(x) \in \mathbb{R}$ und die verwendeten Größen zur Charakterisierung der Eigenschaften dieser Cluster formal diskutiert werden.

Im Rahmen der Clusteranalyse wird die Dichte $D(x)$ in Abhängigkeit eines die Cluster definierenden Cutoffs $D_{\text{cut}} \geq 0$ analysiert. Oft betrachten wir in dieser Arbeit auch die Abhängigkeit des normierten Cutoffs $D_{\text{cut}}/D_{\text{max}}$ mit $D_{\text{max}} = \max_x |D(x)|$. Um bei der Diskussion verschiedener Dichten Verwechslungsgefahren zu vermeiden, werden in der vorliegenden Arbeit die durch die Dichte D beschriebenen Cluster auch als **D -Cluster** bezeichnet. Für jeden Cutoff lassen sich die folgenden Mengen und Größen definieren.

1. Zunächst werden die Mengen $P_{>}$ und $P_{<}$ der Gitterpunkte x bestimmt, deren absolute Dichte größer als der Cutoff-Wert D_{cut} ist: $P_{\geq} = \{x | \pm D(x) \geq D_{\text{cut}}\}$. Im Falle nicht negativer Dichten wie der skalaren Dichte $p(x)$ ist die Menge $P_{<}$ leer.
2. Falls zwei Elemente $x, y \in P_{\geq}$ direkt über einen Link in Richtung $\hat{\mu}$ verbundene Nachbarn auf dem Gitter sind, d.h. $x = y \pm \hat{\mu}$, heißen x und y Link-verbunden $x \leftrightarrow y$. Die Eigenschaft der Link-Verbundenheit ist transitiv, d.h. aus $x \leftrightarrow y$ und $y \leftrightarrow z$ folgt $x \leftrightarrow z$.
3. Die Elemente der Mengen P_{\geq} werden in einem zweiten Schritt vorzeichengleichen Link-verbundenen Clustern $C_{\geq}^i = \{x, y \in P_{\geq} | x \leftrightarrow y\}$ zugeordnet.
4. Die Menge aller disjunkten mindestens zwei Elemente enthaltenden Cluster sei die Menge $C = \{C_{>}^1, \dots, C_{>}^{\text{ctot}_{>}}, C_{<}^1, \dots, C_{<}^{\text{ctot}_{<}}\} = \{C^i, i = 1, \dots, \text{ctot}\}$. Die **Gesamtzahl aller Cluster** ist hierbei $\text{ctot} = \text{ctot}_{<} + \text{ctot}_{>}$.

5. $\theta_{C^i}(x)$ sei die **charakteristische Funktion des Clusters** C^i , d.h.

$$\theta_{C^i}(x) = \begin{cases} 1 & \text{falls } x \in C^i \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$
6. Für das **Zentrum** $x_c^i \in C^i$ des Clusters C^i gilt $|D(x_c^i)| \geq D(x)$, $\forall x \in C^i$.
7. Die **D-Dichte** eines Clusters C^i ist definiert als $D(C^i) = \sum_{x \in C^i} D(x)$.
8. Die **Größe/das Volumen des Clusters** sei $\text{vol}(C^i) = \sum_x \theta_{C^i}(x) \geq 2$. Das größte Cluster sei $C^{\max 1}$, das zweitgrößte $C^{\max 2}$.
9. Das **Clustergesamtvolumen** V_{cluster} ist das Volumen aller Cluster $V_{\text{cluster}} = \sum_{i=1, \dots, \text{ctot}} \text{vol}(C^i)$.
10. Das **mittlere Volumen der Cluster** ist gegeben durch $\langle \text{vol}(C^i) \rangle_i = V_{\text{cluster}} / \text{ctot}$.
11. Die **Packungsdichte** $V_{\text{cluster}} / V_{\text{lat}}$ ist der Anteil der Punkte des Gittervolumens V_{lat} , die Teil eines Clusters sind.
12. Das **fraktionale Volumen des Clusters** C^i ist der Anteil seines Volumens am Gesamtvolumen des Gitters $\text{vol}(C^i) / V_{\text{lat}}$.
13. Das **fraktionale Clustervolumen des Clusters** C^i ist der Anteil seines Volumens am Clustergesamtvolumen $\text{vol}(C^i) / V_{\text{cluster}}$.
14. Der euklidische **Abstand** $d(C^i, C^j)$ zweier Cluster C^i und C^j wird wie folgt definiert:

$$d(C^i, C^j) = \max_{x \in C^i} \left(\min_{y \in C^j} (|x - y|) \right), \quad (3.22)$$

d.h. als Maximum des minimalen Abstandes zwischen einem Punkt des Clusters C^i und einem Punkt des Clusters C^j .

Im Rahmen dieser Arbeit wird vor allem der Abstand der beiden größten Cluster $d(C^{\max 1}, C^{\max 2})$ betrachtet.

15. Die **Cluster-Korrelationsfunktion**

$$f_{C^i}(r) = \frac{\sum_{x,y} \Theta_{C^i}(x) \Theta_{C^i}(y) \delta(r - |x - y|)}{\sum_{x,y} \delta(r - |x - y|)} \quad (3.23)$$

beschreibt die Wahrscheinlichkeit, daß sich zwei Punkte x und y mit euklidischem Abstand r im selben Cluster C^i befinden.

16. Clusterperkolation:

Ein Cluster C^i perkoliert, falls $f_{C^i}(r_{\max}) > 0$, d.h. falls die Wahrscheinlichkeit, daß zwei Punkte des Clusters C^i den größten auf dem Gitter möglichen euklidischen Abstand $r_{\max} = \sqrt{3(L_s/2)^2 + (L_t/2)^2}$ haben, nicht verschwindet. Der Beginn der Perkolation wird als der Wert D_{perc} des die Cluster definierenden Cutoffs D_{cut} festgelegt, für den $f_{C^{\max 1}}(r_{\max}) > 0 \forall D_{\text{cut}} < D_{\text{perc}}$ gilt.

3.6.2 Methoden zur Bestimmung der fraktalen Dimension der Cluster

Im Rahmen dieser Arbeit werden zwei unterschiedliche Verfahren zur Bestimmung der fraktalen Dimension eines Clusters angewandt: eine auf Zufallsbewegungen (Random-Walk) basierte Methode und die Methode der überdeckenden Sphäre. Beide sollen im Folgenden allgemein erläutert werden.

Methode der überdeckenden Sphäre

Hierzu betrachtet man für ein Cluster C^i die Radius-Abhängigkeit der wie folgt definierten kumulierten Clusterdichte $D_{\text{cum}}^i(r) \in [0, 1]$:

$$D_{\text{cum}}^i(r) = \frac{1}{D(C^i)} \sum_{\substack{x \\ |x-x_c^i| \leq r}} \theta_{C^i}(x) D(x) \geq 0 . \quad (3.24)$$

Bildlich gesprochen überdeckt man das zu untersuchende Cluster C^i mit einer im Zentrum x_c^i des Clusters zentrierten vierdimensionalen Kugel mit Radius r und betrachtet die Schnittmenge dieser Kugel und des Clusters C^i . Die kumulierte Clusterdichte $D_{\text{cum}}^i(r)$ ist der Quotient der Summe der Dichte aller Punkte dieser Schnittmenge und der Gesamtladung des Clusters. Aufgrund dieser Normierung gilt $D_{\text{cum}}^i(r) = 1$, sobald das Cluster komplett von der Sphäre überdeckt ist.

Für kleine Radien steigt diese Dichte potenzartig an,

$$D_{\text{cum}}^i(r) \propto r^d , \quad (3.25)$$

wobei d die Dimension des untersuchten Clusters in der Nähe seines Zentrums charakterisiert. Durch Fitten der kumulierten Dichte $D_{\text{cum}}^i(r)$ kann somit eine Aussage über die fraktale Dimension des Clusters gemacht werden.

Problematisch ist dieses Verfahren, falls das zu untersuchende Cluster viele Zweige hat, die innerhalb der Sphäre untereinander nicht verbunden sind, jedoch global Link-verbunden sind und daher in der kumulativen Dichte mit berücksichtigt werden. In diesem Spezialfall würde die Dimension durch diese Methode zu hoch eingeschätzt werden.

Random-Walk-basierte Dimensionsbestimmung

Die Grundidee dieses Ansatzes besteht darin, innerhalb eines Clusters einen diffusiven stochastischen Prozeß zu simulieren, dessen Dynamik abhängig von der Dimension des Clusters ist.

Bekanntlich führen zufällige Bewegungen, die nicht mit ihrer eigenen Vergangenheit korreliert sind, zu Wahrscheinlichkeiten in Form der Gauß'schen Normalverteilung. Der einfachste derartige stochastische Prozeß ist eine ein-dimensionale Zufallsbewegung, ein sog. Random-Walk, der zur Zeit $\tau = 0$ am Punkt x_0 startet und in Zeitabständen von $\Delta\tau$ diskrete Schritte Δx mit gleicher Wahrscheinlichkeit in Vorwärts- bzw. Rückwärtsrichtung zurücklegt. Die Wahrscheinlichkeit, daß sich der Random-Walker zur Zeit $\tau + \Delta\tau$ am Ort x befindet, hängt daher nur von der Wahrscheinlichkeit ab, daß er sich im vorherigen Schritt am Ort $x \pm \Delta x$ befand, d.h.

$$p(x, \tau + \Delta\tau) = 1/2 (p(x - \Delta x, \tau) + p(x + \Delta x, \tau)) \quad (3.26)$$

$$\approx p(x, \tau) + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 p(x, \tau)}{\partial x^2}. \quad (3.27)$$

$p(x, t)$ erfüllt somit die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial p(x, \tau)}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 p(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (3.28)$$

mit der Diffusionskonstante $D = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta\tau}$.

Unter Anwendung des zentralen Grenzwertsatzes kann man für große N zeigen [121], daß die Wahrscheinlichkeit, daß sich der zur Zeit $\tau = 0$ bei x_0 startende Random-Walker zur Zeit $\tau = N\Delta\tau$, d.h. nach N zufälligen Schritten, am Ort x befindet durch

$$p(x, \tau; x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(\tau)^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma(\tau)^2}} \quad (3.29)$$

gegeben ist.

Während der Erwartungswert μ der Verteilung konstant bei $\mu = x_0$ liegt, wächst ihre Varianz $\sigma^2(\tau) = 2D\tau$ mit zunehmendem τ .

Die Rückkehrwahrscheinlichkeit $p(x_0, \tau; x_0, 0)$, d.h. die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit τ wieder am Ausgangspunkt x_0 angelangt zu sein

$$p(x_0, \tau; x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(\tau)^2}} \propto \tau^{-1/2} \quad (3.30)$$

ist somit komplett durch den Normierungsfaktor der Gauß-Verteilung gegeben.

In d Dimensionen wird die Propagation eines Random-Walkers, der sich in jede der $2d$ Richtungen frei bewegen kann, durch eine d -dimensionale Gauß-Verteilung beschrieben, die ebenso normiert bleibt.

Für die Rückkehrwahrscheinlichkeit gilt dann

$$p(x_0, \tau; x_0, 0) \propto \tau^{-d/2} . \quad (3.31)$$

Dieses Potenzverhalten bleibt auch für ungradzahlige Diffusionsdimensionen d gültig und kann ausgenutzt werden, um die fraktale Dimension eines Clusters unbekannter Ausdehnung zu charakterisieren.

Hierzu verwenden wir ein Ensemble von n_{\max} Random-Walkern, die ihre Zufallsbewegungen im Zentrum $x_0 = x_c^i$ des Clusters C^i beginnen und bei jedem Zeitschritt voneinander unabhängig einen Schritt $\Delta x = 1$ entlang eines Links auf dem Gitter gehen. Hierbei ist die Zufallsbewegung auf das Cluster beschränkt, in dem der Random-Walk begann. Ein Random-Walker am Ort x kann daher mit gleicher Wahrscheinlichkeit $1/8 \leq P \leq 1$ nur in die Richtungen $\pm\hat{\mu}$ gehen, für die $x \pm \hat{\mu} \leftrightarrow x$ gilt. Hierin liegt der wesentliche Unterschied und Vorteil dieser Methode gegenüber der Methode der überdeckenden Sphäre. Wenn das Cluster viele Zweige hat, die in einer Umgebung des Maximums nah aneinander liegen, jedoch dort untereinander nicht direkt Link-verbunden sind, ist es den Random-Walkern nicht erlaubt, in die anderen Zweige zu tunneln.

Für kleine Cluster wird die p -Verteilung bereits nach wenigen Schritten stationär. Ist ein Cluster allerdings in einer oder mehreren Dimensionen ausgehnt, so kann sich der Random-Walker in diesen Dimensionen nahezu frei bewegen und die Rückkehrwahrscheinlichkeit kann durch Gleichung (3.31) beschrieben werden.

Um die Dimension des größten Clusters zu messen, werden im Rahmen dieser Arbeit $n_{\max} = 1000$ Random-Walker verwendet und für jedes $\tau = 1, \dots, 100$

die Anzahl $N(\tau)$ der Random-Walker bestimmt, die sich am Punkt x_0 befinden. Durch Fitten der empirischen Rückkehrwahrscheinlichkeit $N(\tau)/n_{\max}$ an Gleichung (3.31) erhält man die Diffusionsdimension d , die die fraktale Struktur des untersuchten Clusters reflektiert.

Kapitel 4

Verteilung der Eigenmoden

4.1 Spektrale Eigenschaften von Overlap-Fermionen

Aus der Ginsparg-Wilson-Gleichung (1.101) und der γ_5 -Hermitizität des Overlap-Operators folgt durch Links- bzw. Rechtsmultiplikation von Gleichung (1.101) mit γ_5

$$D + \gamma_5 D \gamma_5 = a/\rho \gamma_5 D \gamma_5 D \quad \gamma_5 D \gamma_5 + D = a/\rho D \gamma_5 D \gamma_5 \quad (4.1)$$

$$D + D^\dagger = a/\rho D^\dagger D \quad D^\dagger + D = a/\rho D D^\dagger \quad (4.2)$$

die Normalität von D

$$D^\dagger D = D D^\dagger . \quad (4.3)$$

Damit sind Rechts- und Linkseigenvektoren identisch und D und D^\dagger haben komplex konjugierte Eigenwerte und gemeinsame Eigenfunktionen

$$\begin{aligned} D|\psi_i\rangle &= \lambda_{Ni}|\psi_i\rangle \\ D^\dagger|\psi_i\rangle &= \lambda_{Ni}^*|\psi_i\rangle . \end{aligned}$$

Dies stellt sowohl konzeptionell als auch praktisch eine Vereinfachung gegenüber spektralen Untersuchungen mit dem nicht normalen Wilson-Operator dar. Im Falle von Wilson-Fermionen muß zunächst ein Biorthogonalsystem definiert werden und die in der hermiteschen Quantenmechanik übliche Operator-Darstellung erweitert werden [122].

Aus (4.2) folgt für die Eigenwerte des masselosen Overlap-Operators $\lambda_N = x + iy$ mit $x, y \in \mathbb{R}$

$$\lambda_N + \lambda_N^* = \frac{a}{\rho} |\lambda_N|^2 \quad (4.4)$$

$$\frac{2\rho}{a} \operatorname{Re}(x + iy) = |x + iy|^2 \quad (4.5)$$

und damit

$$\left(x - \frac{\rho}{a}\right)^2 + y^2 = \frac{\rho^2}{a^2}. \quad (4.6)$$

Die Eigenwerte liegen demnach in der komplexen Ebene auf einem Kreis um $(\frac{\rho}{a}, 0)$ mit Radius $\frac{\rho}{a}$. Der verbesserte masselose Overlap-Operator $D^{\text{imp}}(0)$ (1.105) projiziert die Eigenwerte λ_N stereographisch auf die imaginäre Achse. Die Eigenwerte der Nullmoden bleiben dabei unverändert, während die Eigenwerte der Nichtnullmoden in Paaren $\lambda^{\text{imp}} = \pm i\lambda$ auftreten. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten spektralen Analysen werden, sofern nicht anders angegeben, stets in Abhängigkeit der Imaginärteile $\pm i\lambda$ diskutiert. Die Eigenvektoren des unverbesserten und verbesserten Overlap-Operators sind identisch. Die Eigenwerte des verbesserten massiven Overlap-Operators $D^{\text{imp}}(m_q) = D^{\text{imp}}(0) + m_q$ sind durch $\lambda^{\text{imp}} + m_q$ gegeben.

Abbildung 4.1 zeigt einen Vergleich des berechneten Spektrums des unverbesserten und des verbesserten masselosen Overlap-Operators zusammen mit dem Ginsparg-Wilson-Kreis für eine Beispielkonfiguration auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter.

Auf dem Gitter wird der Dirac-Operator durch eine $12 V_{\text{lat}} \times 12 V_{\text{lat}}$ -Matrix dargestellt. Aufgrund der hohen Dimension dieser Matrix kommen nur iterative numerische Methoden zur Eigenwertbestimmung in Frage. Zur Berechnung der $\mathcal{O}(150)$ Eigenmoden wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Variante des Arnoldi-Algorithmus, die sog. „Implicit Restarted Arnoldi Method“ [123] eingesetzt.

Zur Charakterisierung der Eigenvektoren $|\psi_i(x)\rangle$ des Overlap-Operators wollen wir an dieser Stelle zunächst drei verschiedene Dichten einführen:

- **die skalare Dichte**

$$p_i(x) = \langle \psi_i(x) | \psi_i(x) \rangle, \quad \sum_x p_i(x) = 1, \quad (4.7)$$

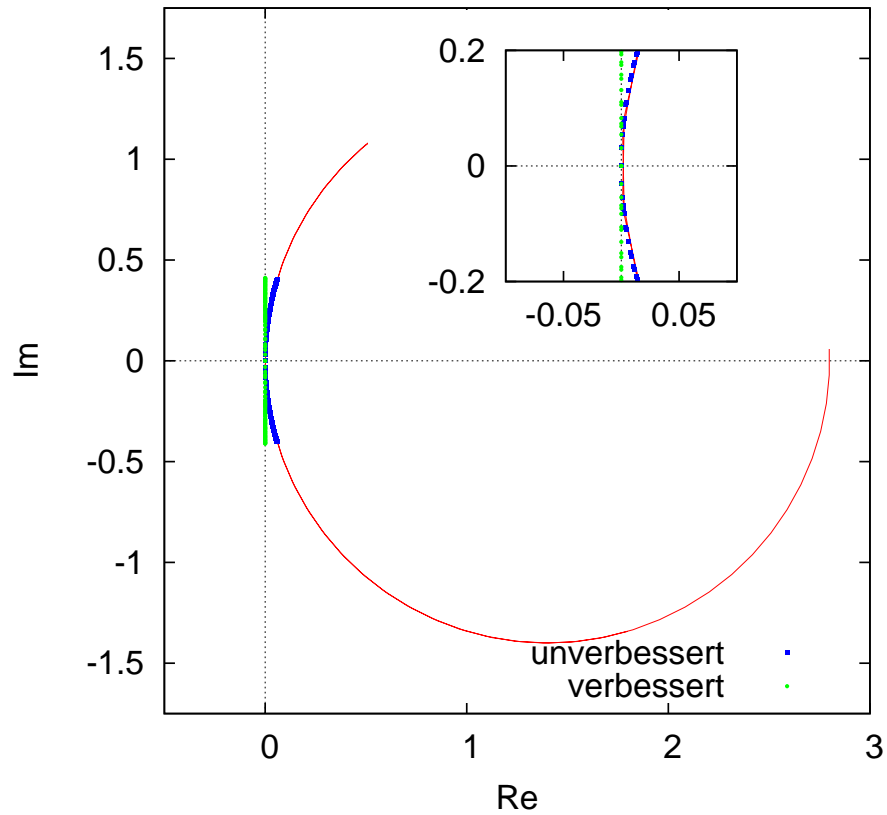


Abbildung 4.1: Vergleich des berechneten Spektrums des unverbesserten und des verbesserten masselosen Overlap-Operators zusammen mit dem Ginsparg-Wilson-Kreis mit Radius $\rho = 1.4$ für eine Beispielkonfiguration mit Ladung $Q = 3$ auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Das rechts oben eingefügte Bild zeigt vergrößert die niedrigsten $\mathcal{O}(20)$ Nichtnullmoden zusammen mit der dreifach entarteten Nullmode.

- **die pseudoskalare Dichte**

$$p_{5i}(x) = \langle \psi_i(x) | \gamma_5 | \psi_i(x) \rangle , \quad (4.8)$$

- **die chirale Dichte**

$$p_{\pm i}(x) = \langle \psi_i(x) | P_{\pm} | \psi_i(x) \rangle \quad (4.9)$$

$$= \frac{1}{2}(p_i(x) \pm p_{5i}(x)) . \quad (4.10)$$

Die Eigenmoden des masselosen Overlap-Operators mit Eigenwerten λ_N können in drei Kategorien eingeteilt werden:

- **Nullmoden:** $\lambda_N = 0$

Die Nullmoden sind chiral, d.h. die Eigenvektoren von D können wie im Kontinuum (1.41) so gewählt werden, daß sie zugleich Eigenvektoren des Chiralitätsoperators γ_5 sind

$$\gamma_5 | \psi_i(x) \rangle = \chi_i | \psi_i(x) \rangle = \pm | \psi_i(x) \rangle . \quad (4.11)$$

Damit gelten folgende Relationen zwischen der skalaren und pseudoskalaren Dichte:

$$p_{5i}(x) = \pm p_i(x) \quad (4.12)$$

$$\chi_i = \sum_x p_{5i}(x) = \pm \sum_x p_i(x) = \pm 1 . \quad (4.13)$$

Lokal ist die pseudoskalare Dichte also bis auf das Vorzeichen mit der skalaren Dichte identisch, die globale Chiralität der Nullmoden χ_i ist exakt ± 1 . Die chirale Dichte $p_{\pm i}(x)$ nimmt damit für Nullmoden mit globaler Chiralität $\chi_i = \pm 1$ lokal den Wert $p_i(x)$ an, während $p_{\mp i}(x)$ verschwindet.

Nach dem Atiyah-Singer-Index-Theorem [124, 125, 126, 127, 128] ist der Index des Overlap-Operators durch

$$Q(D) = N_0^- - N_0^+ = - \sum_{\lambda_{N_i}=0} \sum_x p_{5i}(x) \quad (4.14)$$

gegeben, wobei N_0^- (N_0^+) die Anzahl der Nullmoden mit negativer (positiver) Chiralität ist. Dieser Index entspricht der topologischen Ladung Q einer Konfiguration (vgl. Abschnitt 7.1.2).

- **Komplex konjugierte Nichtnullmoden:** $0 < \text{Re}(\lambda_N) < 2\rho/a$

Diese Moden treten wie im Kontinuum (1.40) in komplex konjugierten Paaren λ_N und λ_N^* mit Eigenmoden $|\psi_\lambda\rangle$ und $|\psi_{\lambda^*}\rangle = \gamma_5|\psi_\lambda\rangle$ auf. Dies folgt sofort aus

$$D\gamma_5|\psi_\lambda\rangle = \gamma_5 D^\dagger|\psi_\lambda\rangle = \lambda_N^* \gamma_5|\psi_\lambda\rangle \quad (4.15)$$

unter Berücksichtigung der Normalität und γ_5 -Hermitizität des Overlap-Operators.

Aus der γ_5 -Hermitizität folgt ferner

$$\lambda_N^* \langle \psi | \gamma_5 | \psi \rangle = \langle \psi | D^\dagger \gamma_5 | \psi \rangle = \langle \psi | \gamma_5 D | \psi \rangle = \lambda_N \langle \psi | \gamma_5 | \psi \rangle . \quad (4.16)$$

Imaginäre Moden haben daher wie im Kontinuum verschwindende globale Chiralität

$$\chi_i = \sum_x p_{5i}(x) = 0 , \quad (4.17)$$

können jedoch eine reiche Struktur in ihrer lokalen chiralen Dichte aufweisen, die mit den zugrunde liegenden Eichfeldern korreliert ist. Der lokale Grad an Chiralität wird in Kapitel 6 eingehend diskutiert.

- **Reelle Moden mit $\lambda_N = 2\rho/a$**

Diese Moden sind wie die Nullmoden chiral, d.h. auch hier können D und γ_5 simultan diagonalisiert werden. Auch sie erfüllen das Indextheorem, allerdings ist zu beachten, daß der Index von D und $2\rho/a - D$ entgegengesetzt ist:

$$Q(2\rho/a - D) = N_{2\rho/a}^- - N_{2\rho/a}^+ = N_0^+ - N_0^- . \quad (4.18)$$

Dies folgt daraus, daß die aufaddierte Chiralität aller Moden verschwindet

$$\sum_i \chi_i = \sum_i \langle \psi_i | \gamma_5 | \psi_i \rangle = \sum_i \sum_{x\alpha\beta} \psi_i^{\alpha*}(x) \gamma_{5\alpha\beta} \psi_i^\beta(x) = \sum_{x\alpha\beta} \gamma_{5\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} = 0 . \quad (4.19)$$

Hierbei wird die Vollständigkeitsrelation $\sum_i \psi_i^{\alpha*}(x) \psi_i^\beta(x) = \delta_{\alpha\beta}$ und die Spurlosigkeit von γ_5 ausgenutzt. Auf diese speziellen reellen Doppler-Moden werden wir jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht eingehen.

4.2 Spektrale Dichte der Eigenmoden im Kontext der chiralen Zufallsmatrixtheorie

Während der geometrische Ort der Eigenwerte des Overlap-Operators – der Ginsparg-Wilson-Kreis – analytisch gegeben ist, ist die Berechnung der Dichte der Moden numerisch sehr aufwendig. Die Verteilung der Eigenmoden und ihre Dichte kann jedoch unter gewissen Voraussetzungen durch die chirale Zufallsmatrixtheorie beschrieben werden. Im Folgenden soll zunächst eine kurze Zusammenfassung der wesentlichen Aspekte der hier relevanten Aspekte der Zufallsmatrixtheorie gegeben werden, bevor die spektrale Dichte der berechneten Eigenmoden näher betrachtet wird. Eine gute Übersicht über die Zufallsmatrixmethode im Kontext der QCD bietet [129].

In der Zufallsmatrixtheorie wird die komplizierte Dirac-Matrix durch eine Matrix mit Gauß-verteilten Zufallszahlen ersetzt, die jedoch die gleichen zugrunde liegenden Symmetrien wie die ursprüngliche Matrix besitzen muß. Die Theorie ist daher ein sehr stark vereinfachtes Modell, das nur sog. universelle Größen beschreiben kann. Diese universellen Größen stimmen in allen Ensembles, die zu ein und derselben Universalitätsklasse gehören, überein und können daher in dem einfachsten Modell einer bestimmten Universalitätsklasse untersucht werden. Für die QCD sind dies die Gauß'schen Ensembles der chiralen Zufallsmatrixtheorie.

Die chirale Zufallsmatrixtheorie [130, 131] basiert auf folgender Partitionsfunktion

$$Z_{N_f, \nu}^{\beta}(m_1, \dots, m_{N_f}) = \int DW \prod_{f=1}^{N_f} \det(\mathcal{D} + m_f) e^{-\frac{N\beta}{4} \text{Tr } v(W^\dagger W)} \quad (4.20)$$

mit der Matrix

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & iW \\ iW^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Hierin ist W eine $n \times m$ -Matrix mit $\nu = m - n$ und $N = n + m$. N wird mit dem dimensionslosen Volumen des modellierten Systems identifiziert.

Das Potential

$$v(\Phi) = \sum_{k \geq 1} a_k \Phi^k \quad (4.22)$$

ist im einfachsten Fall Gauß-verteilter Zufallsmatrizen durch $v(\Phi) = \Sigma^2 \Phi$ gegeben.

Die Werte der Matrix W sind entweder reell, komplex oder quaternionisch reell. Damit lassen sich drei fundamentale Ensembles unterscheiden, die in Tabelle 4.1 zusammen mit ihrem Dyson-Index β [132] aufgeführt werden.

β	W_{ij}		
1	reell	chGOE	chirales Gauß'sches orthogonales Ensemble
2	komplex	chGUE	chirales Gauß'sches unitäres Ensemble
4	quaternion. reell	chGSE	chirales Gauß'sches symplekt. Ensemble

Tabelle 4.1: Übersicht der chiralen Gauß'schen Ensembles der Zufallsmatrixtheorie.

Im Kontinuum hat die QCD mit Fermionen in der fundamentalen $SU(3)_c$ -Darstellung die gleiche Universalitätsklasse wie das chGUE-Ensemble. Auf dem Gitter ist die Universalitätsklasse abhängig von der Diskretisierung des Dirac-Operators. Im Falle von Overlap-Fermionen stimmt sie mit der Universalitätsklasse der Kontinuums-Theorie überein.

Das chGUE-Ensemble reproduziert u.a. die folgenden universellen Eigenschaften der QCD:

- Die spontan gebrochene chirale Symmetrie. Als Ordnungsparameter agiert das chirale Kondensat Σ .
- Die Chiralität der Eigenmoden. Die Nullmoden sind chiral, während die Nichtnullmoden in komplex konjugierten Paaren $\pm i\lambda_i$ auftreten.
- Die topologische Struktur der Partitionsfunktion. Der Index von \mathcal{D} ist durch die Anzahl der Nullmoden $|\nu| = |m - n|$ gegeben und identifiziert den topologischen Sektor des Modells.
- Für Eigenwerte, die kleiner als die sog. Thouless-Energie $E_T \approx \frac{\pi f_\pi^2}{\Sigma}$ sind, werden wichtige spektrale Eigenschaften der QCD durch die Zufallsmatrixtheorie beschrieben. Beispiele sind die mikroskopische spektrale Dichte $\rho_Q(\Sigma V \lambda)$ in einem Sektor mit topologischer Ladung Q (s.u.) oder auch die Verteilung des i -ten Eigenwertes $\rho_{Q_i}(\Sigma V \lambda)$ (vgl. [109]).

Für kleine Eigenwerte $\lambda < E_T$ wird die niedrigenergetische Zustandssumme von Moden mit verschwindendem Impuls dominiert und die Vorhersagen der chiralen Zufallsmatrixtheorie stimmen mit denen der chiralen Störungstheorie für verschwindenden Impuls überein [133].

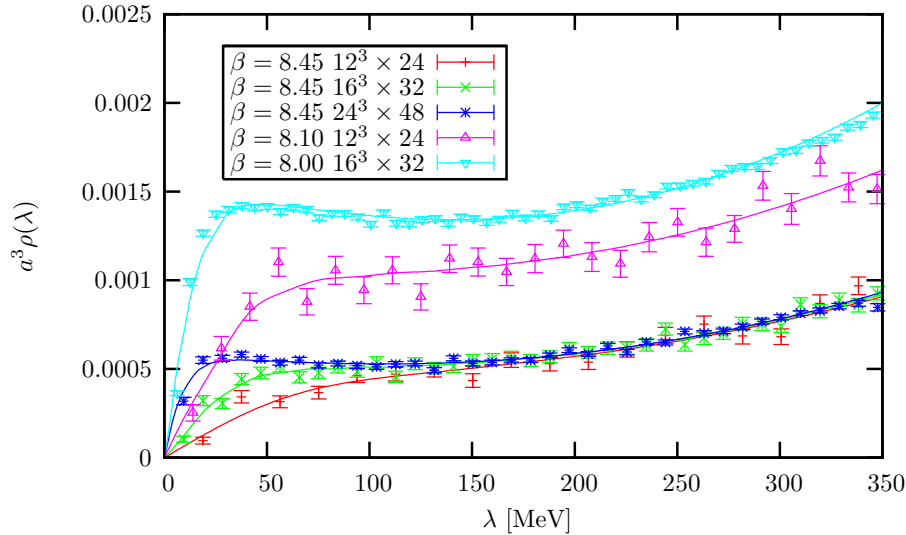


Abbildung 4.2: Die spektrale Dichte $a^3\rho(\lambda, V)$ für alle betrachteten Ensembles zusammen mit Fits basierend auf den Vorhersagen der Zufallmatrixtheorie.

Im Folgenden soll die spektrale Dichte mit der chiralen Zufallmatrixtheorie verglichen werden. Abbildung 4.2 zeigt die spektrale Dichte sowohl für die drei unterschiedlichen Volumina bei gleichem $\beta = 8.45$, als auch für die beiden rauheren Gitter bei $\beta = 8.10$ ($12^3 \times 24$) und $\beta = 8.00$ ($16^3 \times 32$) zusammen mit Fits, die auf den Vorhersagen der Zufallmatrixtheorie beruhen.

Im unendlichen Volumen ist die spektrale Dichte der Nichtnullmoden durch die Banks-Casher-Relation (1.67) mit dem chiralen Kondensat Σ verbunden. Im endlichen Volumen ist die spektrale Dichte gegeben durch

$$\rho(\lambda, V) = \frac{1}{V} \left\langle \sum_{\bar{\lambda}} \delta(\lambda - \bar{\lambda}) \right\rangle, \quad (4.23)$$

wobei sich die Summe über alle positiven nichtverschwindenden Imaginärteile $\bar{\lambda} = \text{Im } \lambda^{\text{imp}}$ der Eigenwerte des verbesserten masselosen Overlap-Operators $D^{\text{imp}}(0)$ erstreckt und $\langle \dots \rangle$ den Ensemble-Mittelwert bezeichnet.

In der Zufallmatrixtheorie ist die spektrale Dichte in einem Sektor mit topologischer Ladung Q durch Besselfunktionen $J_n(x)$ wie folgt gegeben [134]

$$\rho_Q(z) = \frac{z}{2} (J_{|Q|}^2(z) - J_{|Q|+1}(z) J_{|Q|-1}(z)). \quad (4.24)$$

Führt man die mikroskopische Skala [130]

$$z = \Sigma V \lambda \quad (4.25)$$

ein, skaliert die Dichte mit dem Volumen des Systems.

Um die spektrale Dichte zu fitten, verwenden wir daher folgenden Ansatz

$$\rho(\lambda, V) = \Sigma_{\text{eff}} \sum_Q w(Q) \rho_Q(\Sigma_{\text{eff}} V \lambda) . \quad (4.26)$$

Σ_{eff} ist hierbei ein effektiver volumenabhängiger Wert des chiralen Kondensats, der als Fitparameter behandelt wird. Die Gewichte $w(Q)$ der einzelnen topologischen Sektoren, mit der Normierung $\sum_Q w(Q) = 1$, wurden der gemessenen (später in Abbildung 7.4 gezeigten) Ladungsverteilung entnommen. Um Effekte höherer Ordnung in der chiralen Störungstheorie zu berücksichtigen, wurde auch noch ein Term $a_1 \lambda + a_2 \lambda^2$ beim Fitten berücksichtigt.

Im Bereich kleiner Eigenwerte $\lambda < 100$ MeV zeigt die spektrale Dichte eine starke Abhängigkeit vom Volumen. Dies wird vor allem beim Vergleich der drei Ensembles mit gleichem $\beta = 8.45$ deutlich. Die durch separate Fits ermittelten Werte des effektiven chiralen Kondensats für diese drei Ensembles sind in Abbildung 4.3 gezeigt und lassen einen deutlichen Anstieg des effektiven Wertes mit größer werdendem Volumen erkennen.

Während in der vollen dynamischen QCD erwartet wird, daß das chirale Kondensat endlich ist, wird aus verschiedenen theoretischen Gründen [135, 136, 137] in der Valenzquark-Approximation ein divergentes Verhalten des chiralen Kondensats prognostiziert. In der Vergangenheit erwies es sich jedoch als schwierig, den Anstieg auf dem Gitter nachzuweisen.

Die chirale Störungstheorie in der Valenzquark-Approximation sagt ein logarithmisches Anwachsen des effektiven chiralen Kondensats mit größer werdendem $L = V_{\text{lat}}^{1/4}$ voraus [137], das wie folgt parametrisiert werden kann

$$\Sigma_{\text{eff}} = \Sigma \left(1 + 2\delta \ln(0.5L) + 16\pi^2 \delta \beta_2(L_i/L) \right) . \quad (4.27)$$

Hierin ist Σ das chirale Kondensat im unendlichen Volumen, $\beta_2(L_i/L)$ ein Formkoeffizient, der für vierdimensionale Gitter mit $L_t = 2L_s$ den Wert -0.013 annimmt und δ ein Parameter der chiralen Störungstheorie [135, 136], dessen theoretischer Wert $\delta = 0.183$ beträgt.

Ein Fit der effektiven Werte bei $\beta = 8.45$ liefert einen unrenormierten Wert von $a^3 \Sigma = 0.00121(2)$. Dieser Wert ist etwas kleiner als der in [70] auf dem $24^3 \times 48$ -Ensemble bei $\beta = 8.45$ mit einer anderen Methode basierend auf einem Fit der Pionmasse ermittelte Wert $a^3 \Sigma = 0.00138(5)$.

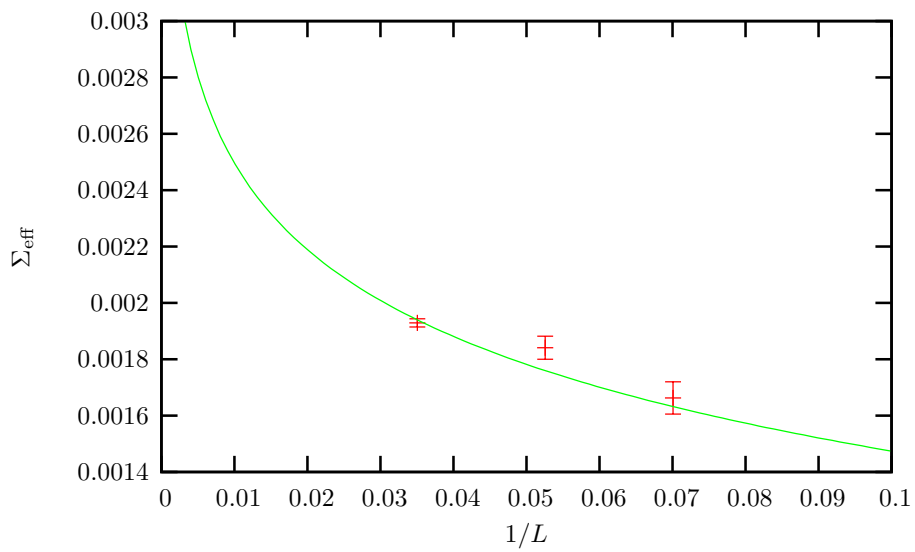


Abbildung 4.3: Das effektive chirale Kondensat Σ_{eff} für die drei Ensembles mit gleichem $\beta = 8.45$ in Abhängigkeit von der inversen Ausdehnung $1/L$ zusammen mit einem Fit basierend auf den Prognosen der chiralen Störungstheorie.

Kapitel 5

Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden

In letzter Zeit hat das Interesse an den Lokalisierungseigenschaften der niedrigen Eigenmoden und deren Dimension stark zugenommen [138, 139, 140, 141, 142]. Dies Interesse beruht primär auf der Vermutung [102, 143, 144, 145], daß diese Moden an niedrigdimensionale Defekte (vgl. Abschnitt 2.2) gebunden sind, die verantwortlich für das Confinement von Quarks sind.

Eine andere Motivation ist die hypothetische Parallele zwischen dem chiralen Phasenübergang der QCD und dem Anderson-Übergang der Festkörperphysik (vgl. Abschnitt 2.3). Wir werden in diesem Kapitel vor allem Methoden der Festkörperphysik zur Beschreibung multifraktaler Strukturen übernehmen.

Um einen ersten visuellen Eindruck der Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden zu vermitteln, zeigen wir in Abbildung 5.1 für eine typische Konfiguration auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter mit $Q = 0$ einen Vergleich der skalaren Dichte der ersten und der 144. Nichtnullmode. Dargestellt sind Profile der skalaren Dichte in der x - y -Ebene für sechs aufeinanderfolgende Zeitschichten. Während man für die erste Nichtnullmode eine starke Lokalisierung in einigen Zeitschichten beobachten kann, ist die 144. Nichtnullmode ausgedehnt und delokalisiert, läßt jedoch auch eine leichte Inhomogenität erkennen.

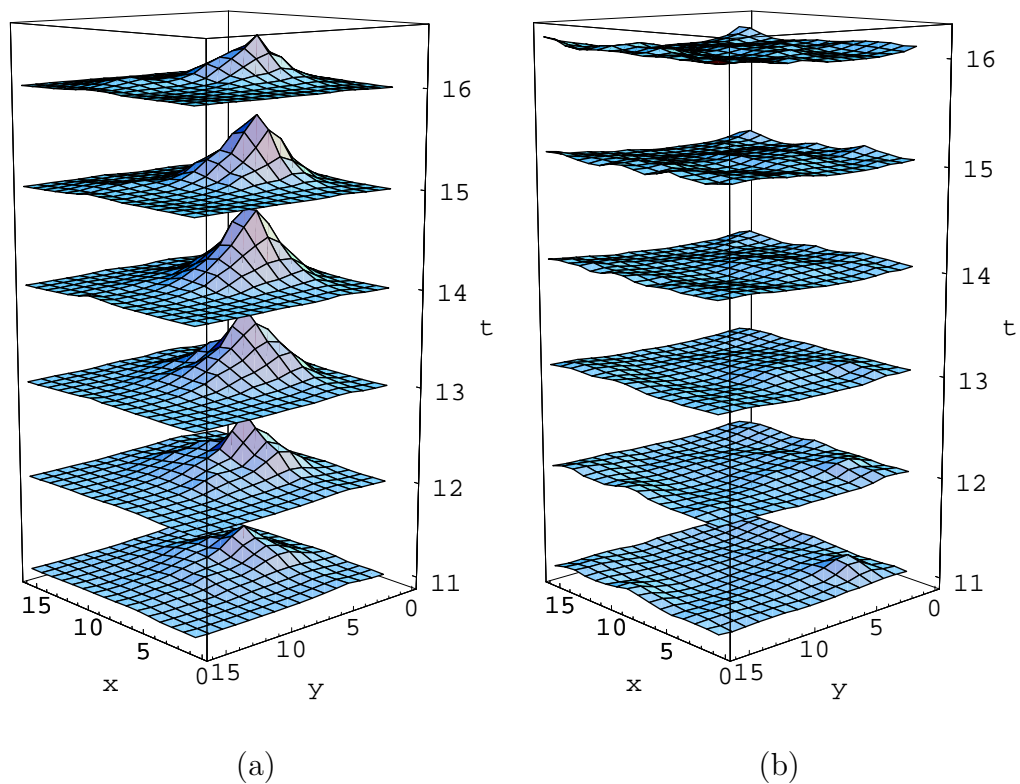


Abbildung 5.1: Die skalare Dichte für die 1. (a) und die 144. (b) Nichtnullmode einer typischen Konfiguration mit $Q = 0$ auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Gezeigt wird das Profil der Dichte in der x - y -Ebene für $t = 11, \dots, 16$.

5.1 Das inverse Partizipationsverhältnis der Eigenmoden

Ein nützliches in der Festkörperphysik weit verbreitetes Maß, um die Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden quantifizieren zu können, ist das inverse Partizipationsverhältnis (Inverse Participation Ratio, IPR)

$$I(\lambda_i) = V_{\text{lat}} \sum_x p_i(x)^2 \quad (5.1)$$

mit der normierten skalaren Dichte $\sum_x p_i(x) = 1$.

I kann Werte im Intervall $[1, V_{\text{lat}}]$ annehmen. Das Minimum wird realisiert, wenn die Dichte vollkommen delokalisiert ist, d.h. auf alle Gitterpunkte gleich verteilt ist, während das Maximum für eine in nur einem einzigen Gitterpunkt extrem lokalisierte Dichte erreicht wird. Einige Beispiele für skalare Dichten und ihre IPRs sind in Tabelle 5.1 zusammengefaßt.

IPR	Dichte	Eigenschaft der Dichte
$I = V_{\text{lat}}$	$p(x) = \delta_{x,x'}$	In einem Punkt x' lokalisierte Dichte
$I = \frac{1}{f}$	$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{fV_{\text{lat}}} & \text{für } x \in G \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$	Auf einem Gebiet G mit einem Anteil f aller Gitterpunkte lokalisierte Dichte
$I = 1$	$p(x) = \frac{1}{V_{\text{lat}}}$	Gleichmäßig über das Gitter verteilte Dichte

Tabelle 5.1: Beispiele für einfache Formen der skalaren Dichte und ihrer inversen Partizipationsverhältnisse (IPR).

Um die Abhängigkeit der Lokalisierungseigenschaften von λ zu veranschaulichen, zeigt Abbildung 5.2 bzw. 5.3 Histogramme bzw. Mittelwerte der IPRs für alle betrachteten Ensembles, sowohl für die Nullmoden, als auch für die Nichtnullmoden. Im Falle der Nichtnullmoden werden die Daten über Bins der Breite 100 MeV bzw. 50 MeV gemittelt.

Die Nullmoden sind stark lokalisiert, aber auch die in dem ersten Bin liegenden Nichtnullmoden, die nach der Banks-Casher-Relation verantwortlich für den Aufbau eines nichtverschwindenden chiralen Kondensats sind, zeigen noch ein hohes Maß an Lokalität. Der Großteil der höheren Nichtnullmoden ist jedoch delokalisiert mit $\langle I \rangle \leq 2.0$.

5. Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden

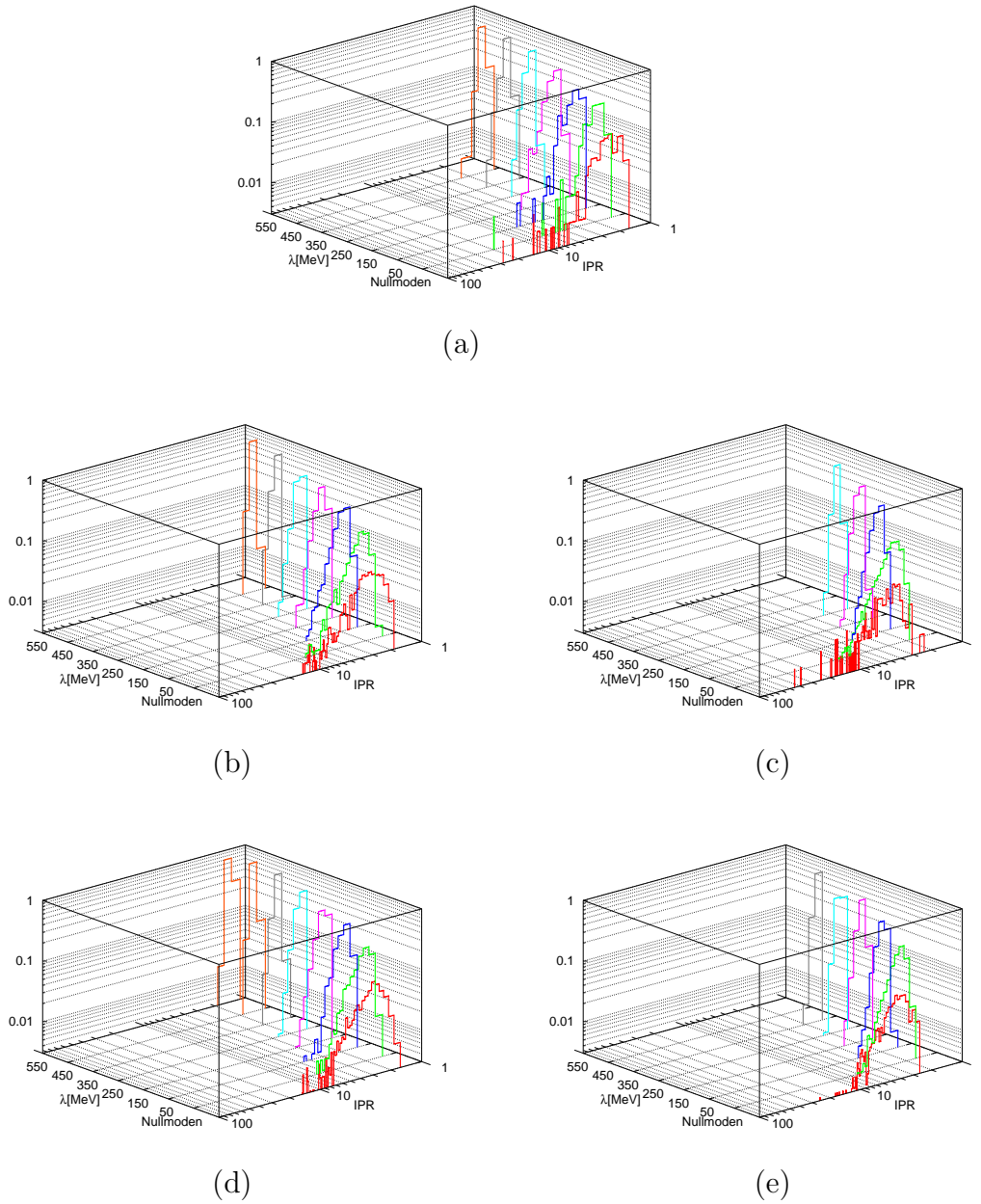


Abbildung 5.2: Normierte Histogramme des inversen Partizipationsverhältnisses (IPR) als Funktion von λ für die folgenden Ensembles: (a) $12^3 \times 24$ bei $\beta = 8.45$, (b) $16^3 \times 32$ bei $\beta = 8.45$, (c) $24^3 \times 48$ bei $\beta = 8.45$, (d) $12^3 \times 24$ bei $\beta = 8.10$, (e) $16^3 \times 32$ bei $\beta = 8.00$. Gezeigt sind die Histogramme der Nullmoden und der Nichtnullmoden, für letztere in Bins der Breite 100 MeV.

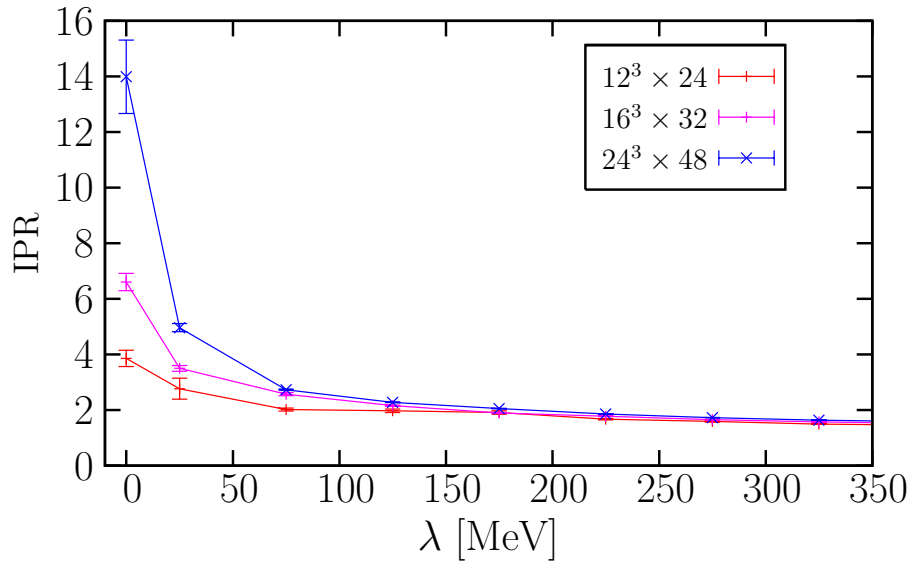


Abbildung 5.3: Die mittleren IPRs der Nullmoden und der Nichtnullmoden, für letztere in Bins der Breite 50 MeV.

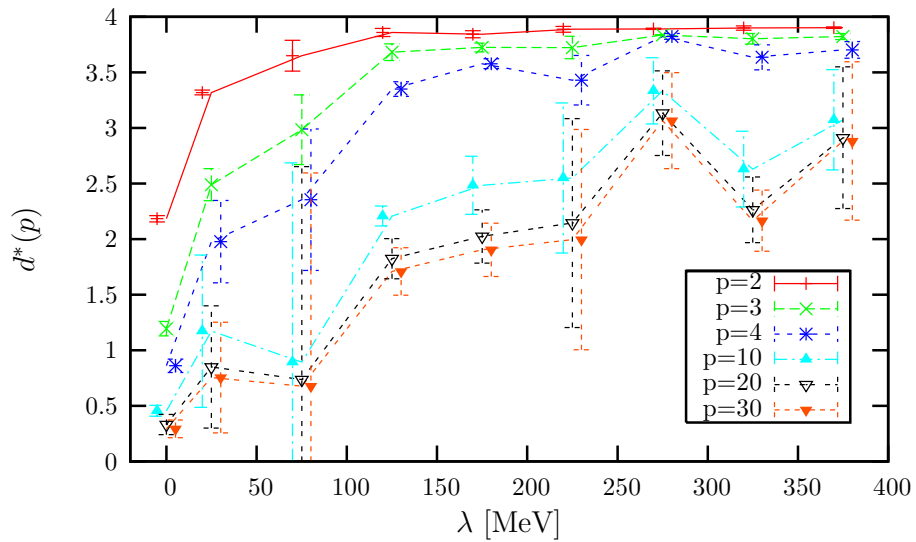


Abbildung 5.4: Die fraktale Dimension $d^*(p)$ für einige Werte von p , bestimmt durch Fitten der L -Abhängigkeit der verallgemeinerten IPRs I_p der drei Ensembles mit gemeinsamem $\beta = 8.45$ und unterschiedlichem $L = L_s = 12, 16, 24$, sowohl für die Nullmoden, als auch die Nichtnullmoden, für letztere in Bins der Breite 50 MeV.

5.2 Multifraktalität der Eigenmoden

Im Rahmen der Theorie des Anderson-Übergangs wurde der Begriff des inversen Partizipationsverhältnis verallgemeinert [107, 108], um den Grad der Lokalisierung auf unterschiedlichen Höhen der skalaren Dichte zu charakterisieren. Hierzu werden höhere Momente der IPRs

$$I_p(\lambda_i) = \sum_x |\psi_i(x)|^{2p} = \sum_x p_i(x)^p \quad (5.2)$$

mit $p \geq 2$ eingeführt. Für $p = 2$ stimmen die verallgemeinerten IPRs bis auf einen Volumenfaktor mit den im letzten Abschnitt betrachteten IPRs $I(\lambda_i) = V_{\text{lat}} I_2(\lambda_i)$ überein.

Im Anderson-Modell ist $\psi_i(x)$ eine Elektron-Wellenfunktion mit Eigenenergie λ_i . Je nachdem, ob sich das System in der metallischen oder der nichtleitenden Phase oder aber in dem kritischen Bereich dazwischen befindet, skalieren die verallgemeinerten IPRs wie in Tabelle 5.2 angegeben und charakterisieren das unterschiedliche Propagationsverhalten der Elektronen.

Phase	Lokalisierung	$I_p \propto$	Propagation von Elektronen
metallisch	delokalisiert	$\propto L^{-d(p-1)}$	frei propagierend
kritisch	multifraktal	$\propto L^{-d^*(p)(p-1)}$	entlang niedrigdimensionaler Strukturen propagierend
nichtleitend	lokalisiert	= const.	nicht propagierend

Tabelle 5.2: Skalierungsverhalten der verallgemeinerten IPRs $I_p(\lambda)$ im Anderson-Modell des Leiter-Isolator-Übergangs. Hierbei charakterisiert L die Ausdehnung des Systems und d bezeichnet die Dimension des Systems, d^* eine fraktale Dimension $d^* < d$.

Der Exponent $d^*(p) < d$ charakterisiert die fraktale Dimension der Bereiche Ω , in denen $|\psi(x)|$ größer als ein bestimmter Wert M ist, der mit zunehmendem p ansteigt. In der nichtleitenden Phase ist Ω nur ein sehr kleiner Teil des Systemvolumens, der im thermodynamischen Limes verschwindet. In der metallischen Phase hingegen füllt ψ das gesamte System dicht aus und Ω ist mit dem Systemvolumen L^d identisch, wobei d die Dimension des einbettenden Raumes ist (in unserem Fall $d = 4$). Im kritischen Bereich wird

das System ebenso von ψ gefüllt, allerdings nicht dicht wie im metallischen Bereich, sondern vielmehr in Form fraktaler Cluster, deren Gesamtvolumen proportional zu $L^{d^*} \ll L^d$ ist. Die Abhängigkeit der fraktalen Dimension d^* dieser Cluster von dem Cutoff M wird als Multifraktalität bezeichnet.

Die gemittelten IPRs in Abbildung 5.3 lassen im Bereich $\lambda < 150$ MeV eine starke Volumen-Abhängigkeit erkennen. Bei festem Gitterabstand a wachsen die IPRs mit dem Volumen an. Um aus der L -Abhängigkeit der verallgemeinerten IPRs bei $\beta = 8.45$ für jedes p fraktale Dimensionen der Moden zu gewinnen, fitten wir sowohl die Daten der Nullmoden, als auch der Nichtnullmoden in Bins mit Breite $\Delta\lambda = 50$ MeV an die bereits in Tabelle 5.2 angegebene Gleichung

$$I_p \propto L^{-d^*(p)(p-1)}, \quad (5.3)$$

wobei L mit der räumlichen Ausdehnung L_s des Gitters identifiziert wird. Die anhand dieser Fits bestimmten fraktalen Dimensionen $d^*(p)$ sind in Abbildung 5.4 gezeigt.

Zunächst sollen die Dimensionen im Fall $p = 2$ diskutiert werden. Für die Nullmoden finden wir eine effektive Dimension $d^*(2) = 2.2(1)$ und für das erste Bin $\lambda \leq 50$ MeV eine Dimension $d^*(2) = 3.3(1)$. Die IPRs der höher liegenden Moden sind unabhängig vom Volumen, ihre Dimension $d^*(2)$ daher nahezu vierdimensional. Diese Moden dehnen sich annähernd frei in vier Dimensionen aus.

Unser Resultat der Dimension $d^*(2)$ der niedrig liegenden Moden ist vergleichbar mit dem der MILC-Konfiguration $d^* = 3.1(2)$ für die niedrigsten acht Moden, das mit sog. Staggered-(Asqtad)-Fermionen auf Tadpoleverbesserten Symanzik-Eichfeldern berechnet wurde [139]. In [140, 141] wurde mit Overlap-Fermionen und unverbesserten Wilson $SU(2)_c$ -Eichfeldern für die Nullmoden die gerundete Dimension $d^* = 1$ und für die Nichtnullmoden mit $0 < \lambda \leq 50$ MeV $d^* = 0$ gefunden. Wie in der Arbeit der MILC-Kollaboration wird hier die Dimension aus der a -Abhängigkeit der IPRs $I(\lambda) \propto a^{d^*-4}$ berechnet. Die großen Unterschiede zu unseren Ergebnissen sind einerseits sicher auf die größeren $\mathcal{O}(a^2)$ -Diskretisierungsfehler der unverbesserten Wilson-Wirkung zurückzuführen. Zum anderen können – wie auch in einem Review von de Forcrand [146] betont wird – bei der Verwendung der Wilson-Wirkung Dislokationen im Kontinuums-Limes dicht werden und die Ergebnisse komplett verfälschen. Die von uns verwendete $\mathcal{O}(a^2)$ -verbesserte Lüscher-Weisz-Wirkung unterdrückt hingegen derartige Dislokationen.

Die Verwendung der verallgemeinerten IPRs erlaubt es uns, die Einsicht in die Struktur der Moden zu vertiefen und die Lokalisierung auf verschiedenen Höhen der skalaren Dichte zu betrachten. In Abbildung 5.4 wird deutlich, daß die Dimensionen für den gesamten betrachteten Spektralbereich mit zunehmendem p zunächst stark abnehmen, bei $p \approx 20$ jedoch einen Grenzwert erreichen, der auch bei weiterer Erhöhung von p im Mittel nicht unterschritten wird. Die Bereiche größter skalarer Dichte sind im Falle der Nullmoden und der Moden mit $0 < \lambda \leq 100$ MeV isolierte Peaks mit einer Dimension kleiner als 1, während für höher liegende Moden die Dimension auf 2–3 ansteigt. Auch die größten Moden, die bei der Betrachtung nur von $p = 2$ als frei in vier Dimensionen ausgedehnt eingeschätzt würden, besitzen eine multifraktale Substruktur.

Es scheint daher, daß der komplette Bereich der niedrigen Eigenmoden durch kritische Statistik beschrieben wird, analog zu bestimmten ungeordneten Systemen der Festkörperphysik [147].

5.3 Clusteranalyse der Eigenmoden

Die IPRs geben keinerlei Auskunft über die Zusammengehörigkeit der Bereiche hoher skalarer Dichte. Ein zufälliges Durchmischen der Gitterpunkte würde dieselben IPR-Werte liefern. Um die Zusammengehörigkeit von Punkten hoher Dichte zu untersuchen, wurde eine Clusteranalyse (s. Abschnitt 3.6.1) der skalaren Dichte auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ durchgeführt. Analysiert werden Link-verbundene Bereiche (Cluster) der nach unten abgeschnittenen skalaren Dichte mit $p(x)/p_{\max} \geq p_{\text{cut}}/p_{\max}$ in Abhängigkeit des normierten Cutoffs p_{cut}/p_{\max} . Hierbei ist p_{\max} die maximale skalare Dichte der betrachteten Konfiguration. Bei großem Cutoff p_{cut}/p_{\max} wird somit die Zusammengehörigkeit von Gebieten hoher skalarer Dichte untersucht.

Die Ergebnisse der Clusteranalyse sind in Abbildung 5.5 und 5.6 gezeigt und sollen im Folgenden diskutiert werden. Sofern nicht anders angegeben, werden die beschriebenen Größen über alle analysierten Konfigurationen gemittelt.

- **Clusterperkolation** (Abb. 5.5 (a))
Ein Cluster perkoliert, falls zwei Punkte dieses Clusters den maximal möglichen euklidischen Abstand auf dem Gitter haben. Zur Charakterisierung der Perkolations wird die über alle Konfigurationen gemittelte Cluster-Korrelationsfunktion $f_{C^{\max 1}}(r_{\max})$ (3.23) des jeweils größten

Clusters betrachtet. Für große Cutoffs $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ verschwindet diese Funktion. Das $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ -Intervall, in dem die Funktion verschwindet, bezeichnen wir als nichtperkolierendes Regime. Das Einsetzen der Perkolations wird durch den Cutoff-Wert $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ bestimmt, bei dem die über alle Konfigurationen gemittelte Korrelationsfunktion $f_{C^{\text{max}1}}(r)$ beginnt, sich von Null zu unterscheiden. Die Perkolations des größten Clusters der skalaren Dichte der Nullmoden setzt von großen Cutoff-Werten $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ ausgehend erst bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.25$ mit geringer Wahrscheinlichkeit ein, während die höher liegenden Moden bereits bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} \approx 0.4\text{--}0.5$ anfangen zu perkolieren. Für kleinere Cutoffs wächst die Perkolationswahrscheinlichkeit im Falle der höher liegenden Moden stark an und erreicht bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.05$ bereits 80–90%. Im Falle der Nullmoden beträgt die Wahrscheinlichkeit bei diesem Cutoff hingegen lediglich 0.01%. Auffallend ist, wie auch bei anderen Ergebnissen der Clusteranalyse, daß das Verhalten der niedrigsten Nichtnullmoden und der Nullmoden sehr ähnlich ist.

- **Anzahl der Cluster** (Abb. 5.5 (b))

Die Anzahl der Cluster erreicht bei den Nullmoden bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.1$ mit ca. 4 Clustern ihren Höhepunkt, während bei den höchsten betrachteten Nichtnullmoden die maximale Anzahl von 18 Clustern zusammen mit dem Einsetzen signifikanter Perkolations bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.3$ auftritt. Es scheint verschiedene Zentren zu geben, die die Moden „anziehen“. Der Mechanismus dieser Anziehung ist aber sicher für die Nullmoden (vermutlich an Peaks der topologischen Ladung gebunden) und die hohen Moden (evtl. eher im Stil des Anderson-Modells) nicht identisch.

- **Fraktionales Volumen der beiden größten Cluster $C^{\text{max}1}$ und $C^{\text{max}2}$** (Abb. 5.5 (c),(d))

Vergleicht man das fraktionale Volumen der beiden größten Cluster, d.h. deren Volumen relativ zum gesamten Gittervolumen V_{lat} , so wird deutlich, daß das Gittervolumen für kleine $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ durch ein großes Cluster der skalaren Dichte dominiert wird. Während die stark lokalisierten Nullmoden erst bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} \approx 0.15$ beginnen, mehr als 1% des gesamten Gittervolumens zu füllen, ist dies bei den größten betrachteten (120.) Nichtnullmoden bereits bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} \approx 0.35$ der Fall. Im Falle der Nullmoden nimmt die skalare Dichte mit $p(x) \geq 0.05 p_{\text{max}}$ lediglich 10% des Gittervolumens ein, während die höchsten untersuchten Moden 95% füllen und daher stark delokalisiert sind. Das zweitgrößte Cluster nimmt maximal nur 0.2–0.35% des Gittervolumens V_{lat} ein.

- **Fraktionales Clustervolumen aller Cluster** (Abb. 5.6)

Relativ zum Gesamtvolumen gesehen ist das Volumen des zweitgrößten Clusters sehr klein. Im Bereich des Maximums der Anzahl der Cluster nimmt das fraktionale Clustervolumen des größten Clusters, d.h. sein Volumen relativ zum Volumen aller Cluster, jedoch deutlich ab, im Fall der Nullmoden im Mittel auf 83% und im Fall der höchsten betrachteten Moden teils auf 54%. Relativ zum Clustergesamtvolumen gesehen wächst die Größe der kleineren Cluster in der Umgebung des Maximums auf etwa 10% (Nullmoden) bis 20% (120. Mode) an. Entfernt man sich von dem Maximum, so dominiert sehr rasch das größte Cluster nahezu komplett auch das Clustergesamtvolumen V_{cluster} . Das fraktionale Clustervolumen aller Cluster der 1. Nichtnullmode und der 90. Nichtnullmode für $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.10$ und $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.30$ wird exemplarisch für eine Konfiguration in Abbildung 5.6 gezeigt. Im Bereich des Maximums der Anzahl der Cluster sind die kleineren Zentren der Dichte demnach durchaus relevant.

- **Die fehlende Norm** (Abb. 5.5 (e))

Die fehlende Norm [148]

$$N(p_{\text{cut}}) = 1 - \sum_{\substack{x \\ p(x) \geq p_{\text{cut}}}} p(x) \quad (5.4)$$

mißt den Anteil der Norm der skalaren Dichte $p(x)$, der nicht von den Bereichen mit $p(x) \geq p_{\text{cut}}$ beigetragen wird. Im Fall der Nullmoden und der niedrig liegenden Moden fällt die fehlende Norm bereits bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.25$ auf 80% herab, während bei den höheren Moden dies erst bei $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.1$ der Fall ist. Wesentliche Beiträge zur Norm sind für die Nullmoden daher in den Maxima der Dichte lokalisiert, während im Fall der niedrigeren Moden die Dichte gleichmäßiger über das Gitter verteilt ist.

- **Dimension der Moden** (Abb. 5.5 (f))

Die Methoden zur Dimensionsbestimmung sind in Abschnitt 3.6.2 erklärt und werden im Rahmen der Bestimmung der Dimension des größten Clusters der topologischen Ladungsdichte in Abschnitt 7.3.3 detaillierter veranschaulicht. Hier wollen wir nur die wesentlichen Ergebnisse diskutieren. Abbildung (f) zeigt die mit der Random-Walk-basierten Methode bestimmte Dimension des größten dominanten Clusters der skalaren Dichte. Die Dimensionen reichen in allen Fällen von $d^* = 0$ bis $d^* = 3.5$. Die Nullmoden sind beim Einsetzen der Perkolations zweidimensional, wie auch die Betrachtung der IPRs $I = I_2$

gezeigt hat. Konzentriert man sich auf die Maxima der skalaren Dichte (große $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$), so sinkt die Dimension der Nullmoden bis auf 0 ab, vergleichbar mit der Betrachtung höherer Momente der IPRs. Die Dimension der höheren Moden ist bis auf extreme $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ -Werte stets deutlich größer als die der Nullmoden. Etwa beträgt die Dimension der höchsten Moden bei dem Cutoff, an dem die Nullmoden zweidimensional sind, $d^* = 3$. Die genauen Ergebnisse der Random-Walk-basierten Dimensionsbestimmung sind Tabelle A.3 im Anhang zu entnehmen. Tabelle A.4 im Anhang zeigt die mit der Methode der überdeckenden Sphäre gewonnenen Dimensionen. Unter Berücksichtigung aller Gitterpunkte liefert diese Methode für die Nullmoden eine Dimension von $d^* = 1.9$ und für die höheren Moden $d^* = 3.1$.

5. Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden

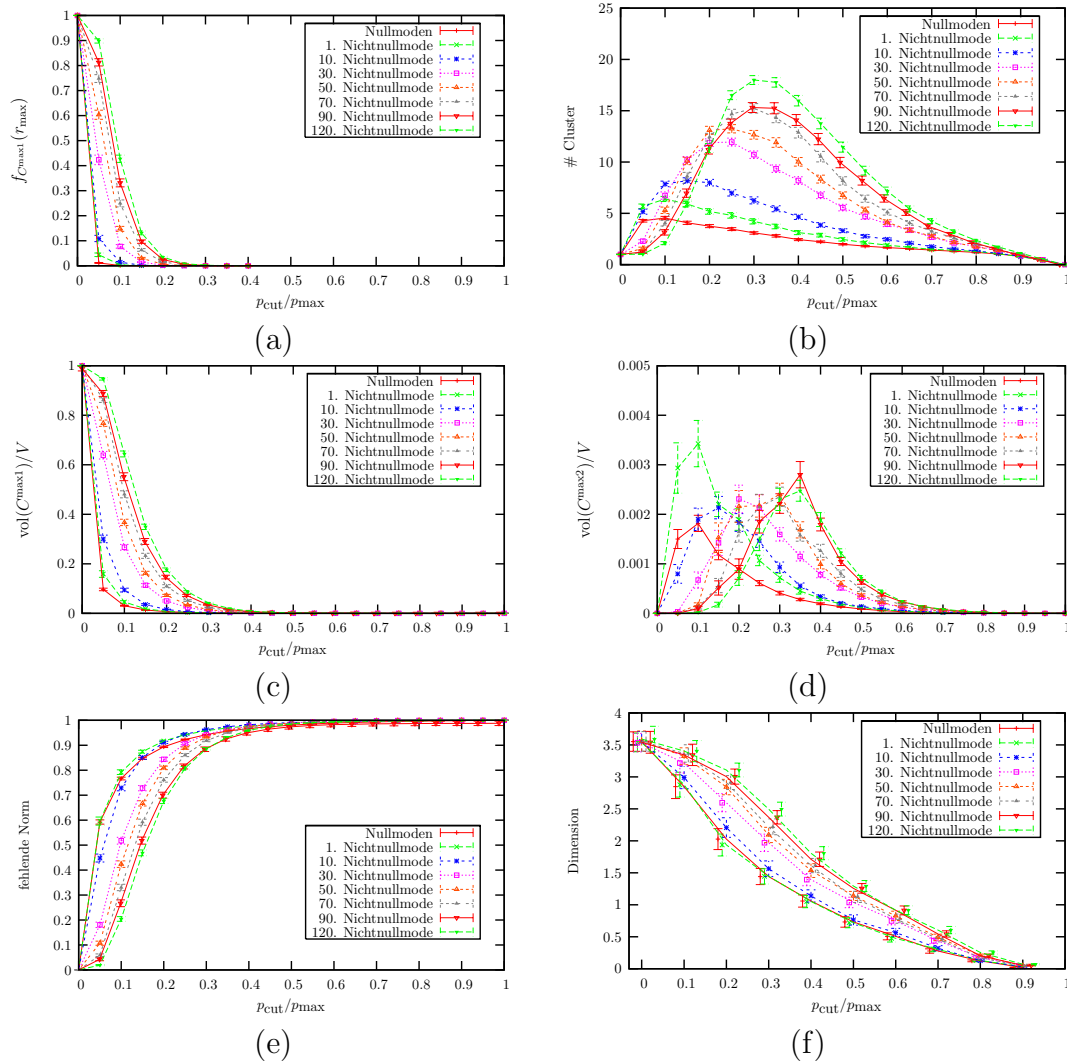


Abbildung 5.5: Ergebnisse der Clusteranalyse bzgl. der skalaren Dichte für die Nullmoden und sieben ausgewählter Nichtnullmoden, gemittelt über die Konfigurationen des Ensembles auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Gezeigt wird die $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ -Abhängigkeit für folgende über alle Konfigurationen gemittelte Größen: (a) die Perkolationsfunktion des größten Clusters, (b) die Anzahl der Cluster, das fraktionale Volumen des größten (c) bzw. des zweitgrößten Clusters (d), (e) die fehlende Norm und (f) die mit der Random-Walk-basierten Methode bestimmte effektive Dimension der Moden.

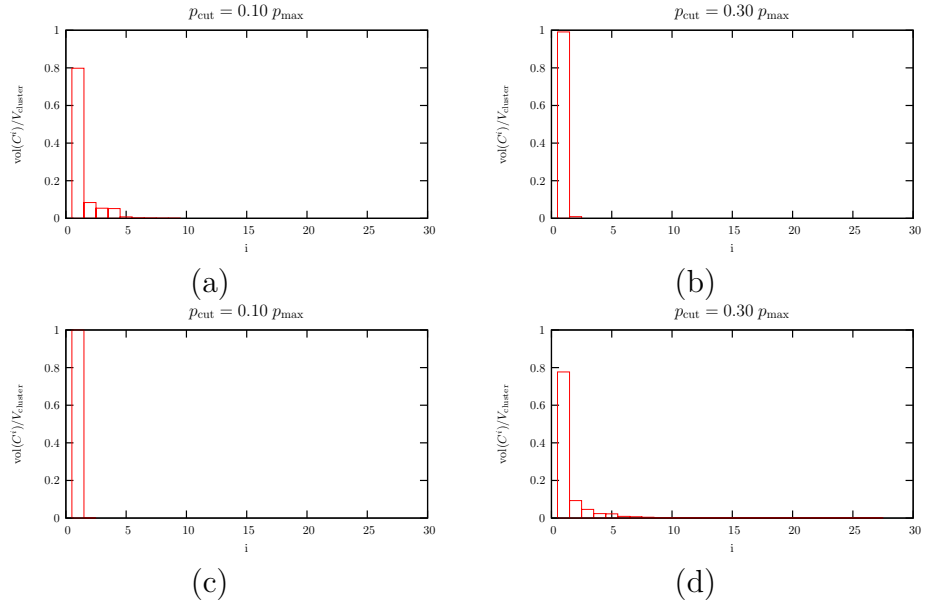


Abbildung 5.6: Ergebnisse der Clusteranalyse der skalaren Dichte für eine typische Konfiguration auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Gezeigt wird das Clustervolumen aller Cluster der 1. Nichtnullmode (obere Reihe) und der 90. Nichtnullmode (untere Reihe) für $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.10$ (linke Spalte) und $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}} = 0.30$ (rechte Spalte).

Kapitel 6

Chirale Eigenschaften der Eigenmoden

In Abschnitt 2.1 wurde geschildert, daß nach dem Instanton Mischungs-Szenario der spontanen Symmetriebrechung die niedrig liegenden Nichtnullmoden ein hohes Maß an lokaler Chiralität besitzen sollten, obwohl ihre globale Chiralität verschwindet.

Um die lokale Chiralität der Moden λ_i zu studieren, ist es instruktiv, sich das Verhältnis

$$r_i(x) = p_{-i}(x)/p_{+i}(x) = \begin{cases} 0 & \text{für + Chiralität} \\ \infty & \text{für - Chiralität} \end{cases} \quad (6.1)$$

anzusehen, das für exakt chirale Moden den Wert 0 bzw. ∞ annimmt, während es im allgemeinen Fall eine Funktion von x ist.

Um die durch das Instanton-Modell prognostizierte Verteilung der lokalen Chiralität zu testen, wurde von Horváth *et al.* vorgeschlagen [22], obiges Verhältnis via

$$X_i(x) = \frac{4}{\pi} \arctan \left(\sqrt{r_i(x)} \right) - 1 = \begin{cases} -1 & \text{für + Chiralität} \\ +1 & \text{für - Chiralität} \end{cases} \quad (6.2)$$

auf das Intervall $[-1, +1]$ abzubilden.

Falls es in den zugrunde liegenden Eichfeldern Bereiche hoher Selbstdualität gibt, sollte die Verteilung dieser Variable um die Werte ± 1 gebündelt sein, wenn man Gitterpunkte nahe der Spitzen der skalaren Dichte $p(x)$ betrachtet.

In der ursprünglichen Arbeit von Horváth *et al.* [22] wurden derartige Doppel-Peaks nicht beobachtet, was als Indiz gegen das Instanton-Bild interpretiert wurde. Allerdings wurden die Untersuchungen mit Wilson-Fermionen gemacht, die aufgrund der expliziten Brechung der chiralen Symmetrie weniger zur Untersuchung chiraler Eigenschaften der Moden geeignet sind. Diese Arbeit hat sofort eine Reihe von Untersuchungen der niedrig liegenden Moden mit unterschiedlichen Wirkungen induziert [149, 150, 151, 152, 153, 154, 155].

In der vorliegenden Arbeit soll die Verteilung der lokalen Chiralitätsvariable sowohl in Abhängigkeit der betrachteten Overlap-Nichtnullmoden als auch in Abhängigkeit der Anzahl der berücksichtigten Gitterpunkte analysiert werden. Hierbei betrachten wir normierte Histogramme von $X(x)$ unter Berücksichtigung von 1%, 6.25%, 12.5% und bzw. 50% aller Gitterpunkte mit größter skalarer Dichte $p(x)$. Für chirale Nullmoden wären die Histogramme δ -Funktionen bei ± 1 unabhängig von dem Anteil der beachteten Gitterpunkte. Wir sind jedoch am Verhalten der niedrig liegenden Nichtnullmoden interessiert und mitteln jeweils über alle $16^3 \times 32$ -Konfigurationen bei $\beta = 8.45$ mit verschwindender topologischer Ladung. Dieses Unterensemble umfaßt insgesamt 37 Konfigurationen.

In Abbildung 6.1 und 6.2 zeigen wir in den linken Bildern für jeden dieser Cutoffs bzgl. der skalaren Dichte $p(x)$ die Verteilung der lokalen Chiralität separat für die ersten nach ihrem Betrag sortierten 20 Nichtnullmoden. Da die komplex konjugierten Paare die gleiche lokale Chiralität besitzen, sind in den linken Abbildungen lediglich 10 Histogramme eingezeichnet. In den rechten Abbildungen wird die lokale Chiralität über alle Eigenmoden gemittelt, deren absolute Eigenwerte in Bins der Breite 100 MeV fallen. Gezeigt werden acht Histogramme, die den Bereich $0 < |\lambda| \leq 800$ MeV abdecken.

Beim Vergleich der Bilder sieht man, daß die Verteilung der lokalen Chiralität des niedrigsten Modenpaares bei Beschränkung auf nur 1% der Gitterpunkte mit größter skalare Dichte $p(x)$ am stärksten in der Nähe von $X \approx \pm 0.75$ konzentriert ist (vorderstes Histogramm in Abb. 6.1 (a)). Betrachtet man bei gleichem Anteil der berücksichtigten Gitterpunkte die X -Verteilung für höhere Moden, so wird die Intensität der Peaks geringer, aber auch das Histogramm für die 20. Mode zeigt noch deutlich die Doppel-Peak-Struktur. Wie Abb. 6.1 (b) demonstriert, verschwindet diese Struktur jedoch vollkommen, wenn man zu höheren Eigenmoden übergeht. Dort verschwindet die Verteilung nun in der Nähe von $X \approx \pm 1$ vollkommen und zeigt dafür ein breites flaches Plateau im Bereich $-0.5 \leq X \leq 0.5$.

Da Quantenfluktuationen vor allem Einfluß auf Gitterpunkte mit niedriger skalarer Dichte haben, ist es verständlich, daß die Doppel-Peak-Struktur bei starker Beschränkung auf die Maxima der Peaks der skalaren Dichte besonders deutlich in Erscheinung treten.

Beim Betrachten der lokalen Chiralität der Moden in Abhängigkeit der berücksichtigten Gitterpunkte fällt auf, daß die Intensität der Verteilung bei $X \approx 0.75$ mit zunehmender Anzahl von Gitterpunkten deutlich abnimmt und die flache breite Verteilung im Bereich $-0.5 \leq X \leq 0.5$ bereits für sehr niedrig liegende Moden auftritt. So zeigen bei Berücksichtigung der Hälfte der Gitterpunkte in Abbildung 6.2 (c) nur mehr die beiden niedrigsten Modenpaare andeutungsweise die Doppel-Peak-Struktur. Die Verteilung für das niedrigste Eigenmoden-Intervall, gezeigt im vordersten Histogramm in Abbildung 6.2 (d), erinnert an die Verteilung der höheren Moden im Intervall mit $\lambda > 700$ MeV in Abbildung 6.2 (b) (1% der Gitterpunkte). Je mehr Gitterpunkte berücksichtigt werden, desto schmaler wird die Verteilung der höheren Moden und desto stärker ihr Maximum bei $X = 0$.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die niedrig liegenden Moden wie im Rahmen des Instanton-Modells erwartet ein hohes Maß an lokaler Chiralität zeigen, sofern man sich auf Gitterpunkte mit starker skalarer Dichte beschränkt. In Abschnitt 7.5 wird gezeigt, daß für diese Moden eine starke Korrelation mit der topologischen Struktur der zugrunde liegenden Eichfelder besteht.

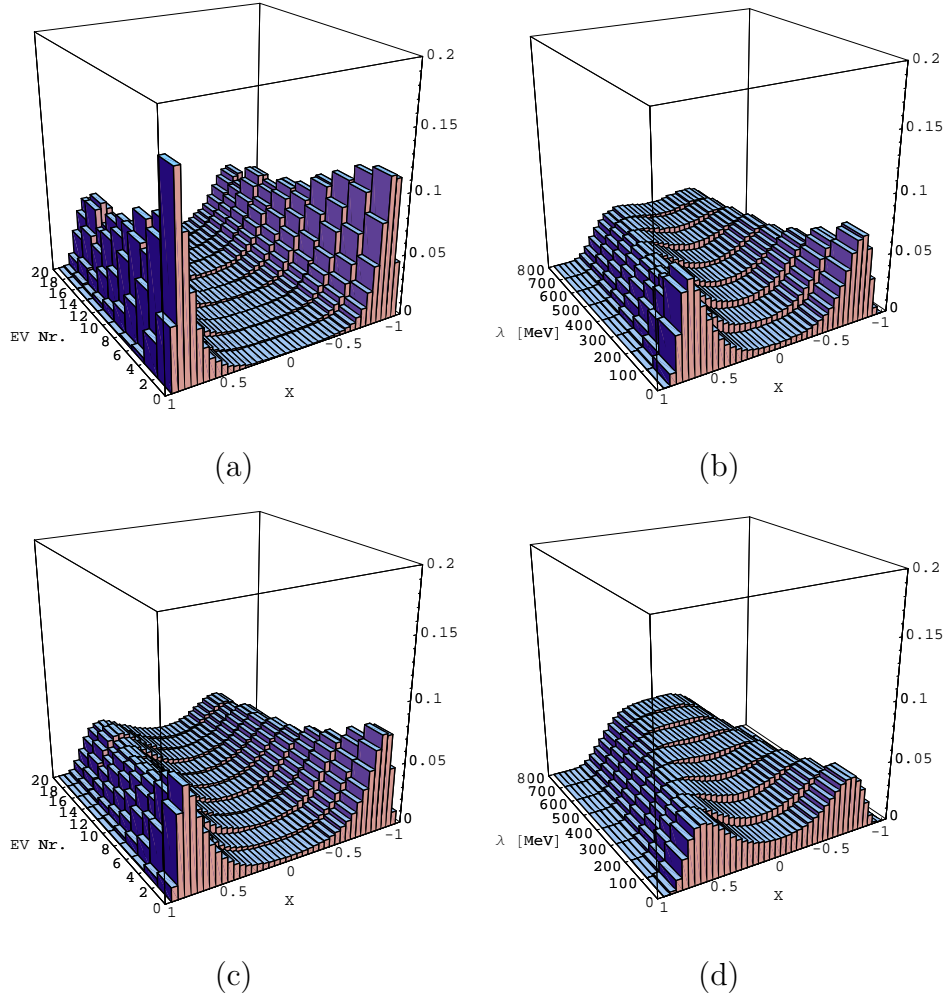


Abbildung 6.1: Normierte Histogramme der lokalen Chiralität $X(x)$ beschränkt auf die Konfigurationen mit $Q = 0$ des Ensembles auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Gezeigt werden die Histogramme der niedrigsten 10 Paare komplex konjugierter Moden (links) und aller berechneter Moden (rechts), für letztere gemittelt über Bins der Breite 100 MeV. Die oberen beiden Bilder berücksichtigen 1%, die unteren beiden 6.25% der Gitterpunkte mit größter skalarer Dichte $p(x)$.

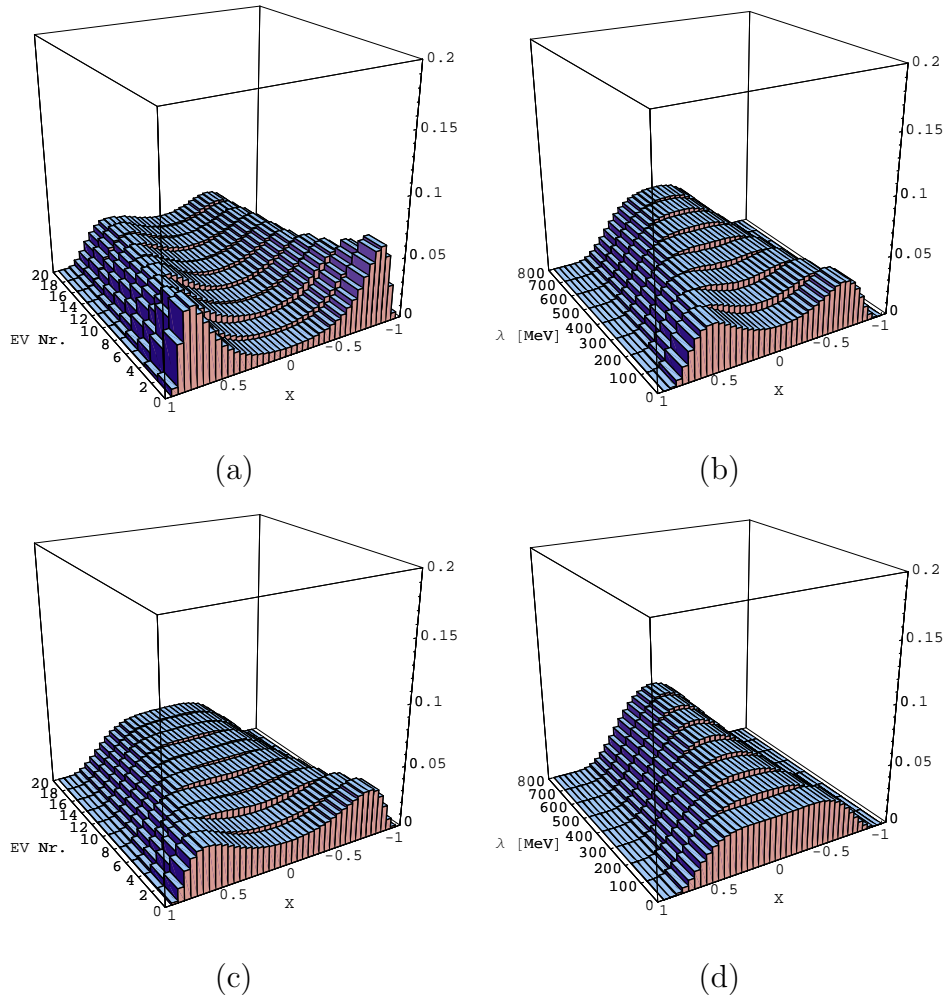


Abbildung 6.2: Normierte Histogramme der lokalen Chiralität $X(x)$ analog zu Abb. 6.1, allerdings in der oberen Bildreihe für 12.5% und in der unteren Bildreihe für 50% der Gitterpunkte mit größter skalarer Dichte $p(x)$.

Kapitel 7

Die topologische Ladungsdichte

7.1 Die topologische Ladung

Die topologische Ladungsdichte von Eichfeldern ist im Kontinuum wie folgt definiert

$$q(x) = \frac{g^2}{16\pi^2} \text{Tr} F_{\mu\nu}(x) \tilde{F}_{\mu\nu}(x) . \quad (7.1)$$

Hierbei ist $F_{\mu\nu}$ der gluonische Feldstärketensor und $\tilde{F}_{\mu\nu}$ der bereits in (2.2) definierte duale Feldstärketensor. Das Integral über diese Dichte

$$Q = \int d^4x q(x) \quad (7.2)$$

ist die bereits in (2.3) eingeführte topologische Ladung. Die topologische Ladung ist identisch mit dem Pontryagin-Index bzw. der Windungszahl einer Eichfeldkonfiguration und kann als topologische Invariante nur ganzzahlige Werte annehmen. $SU(3)_c$ -Eichfeldkonfigurationen mit unterschiedlichen Windungszahlen können nicht durch eine glatte Deformation der Felder ineinander übergeführt werden. Dadurch lassen sich Konfigurationen in unterschiedliche Homotopieklassen bzw. topologische Sektoren einteilen.

Die topologische Suszeptibilität kann wie folgt definiert werden

$$\chi = \int d^4x \langle q(x)q(0) \rangle = \frac{\langle Q^2 \rangle}{V} \geq 0 , \quad (7.3)$$

wobei der Mittelwert über alle Konfigurationen gebildet wird.

Die oben definierten topologischen Größen sind vor allem aufgrund folgender Eigenschaften und Beziehungen zu hadronischen Observablen relevant. Einige dieser Eigenschaften wurden jedoch innerhalb semiklassischer Modelle entwickelt, die angesichts der im Folgenden aufgezeigten niedrigdimensionalen globalen Struktur der topologischen Ladung nur beschränkt gültig sein können bzw. modifiziert werden müssen. Auf jeden Fall bieten sie jedoch die Motivation zur Untersuchung der topologischen Struktur des QCD-Vakuums.

- Eines der größten Erfolge des Instanton-Modells ist 't Hoofts Lösung [39] des $U(1)_A$ -Problems. Aufgrund der axialen Anomalie tritt in der Ableitung des Flavour-Singulett-Axialvektorstroms ein zusätzlicher Term auf, der proportional zur topologischen Ladungsdichte (vgl. Tabelle 1.1) ist:

$$\partial^\mu A_\mu(x) = 2m_q P(x) + 2N_f q(x) \quad (7.4)$$

und im Instanton-Modell erklärt werden konnte.

- Die Witten-Veneziano-Relation [95, 156]

$$m_{\eta'}^2 - (2m_K^2 - m_\eta^2) = \frac{2N_f}{f_\pi^2} \chi_{\text{quenched}} \quad (7.5)$$

setzt den Wert der topologischen Suszeptibilität in der Valenzquark-Approximation, χ_{quenched} , mit den Massen des η' , der η und K-Mesonen sowie der Pionen-Zerfallskonstante f_π und der Flavouranzahl N_f in Verbindung. Die Relation wurde im Limes $N \rightarrow \infty$ hergeleitet und ist unabhängig von semiklassischen Modellen.

- Im Falle leichter Quarks prognostiziert die chirale Störungstheorie [157, 158], daß die topologische Suszeptibilität im Falle unendlichen Volumens linear mit der Quarkmasse m_q anwächst

$$\lim_{m_q \rightarrow 0} \chi = \frac{\Sigma m_q}{N_f^2} + \mathcal{O}(m_q^2) = \frac{f_\pi^2 m_\pi^2}{2N_f} + \mathcal{O}(m_\pi^4) \quad (7.6)$$

und im chiralen Limes verschwindet. Hierbei ist Σ das chirale Kondensat und $f_\pi \approx 92.4$ MeV [16] die Pion-Zerfallskonstante. Zur Umformung wurde die in der PCAC-Theorie gewonnene sog. Gell-Mann-Oakes-Renner-Relation (1.60) verwendet.

- In dem Instanton-Flüssigkeitsmodell, das durch Shuryak [91, 90], Dia-
konov und Petrov [92] entwickelt wurde, propagieren leichte Quarks, indem sie von einem topologischen Objekt zum nächsten „springen“. Die

topologische Struktur der Eichfelder sollte damit auch Auswirkungen auf die Propagation von Elementarteilchen haben und damit wichtige hadronische Größen wesentlich beeinflussen.

- In dem „Mischungsszenario“ von Instantonen [92] wird das Auftreten von kleinen Nichtnullmoden durch eine Überlappung von Instantonen und Antiinstantonen erklärt. Das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung ist somit vermutlich ebenso eng mit topologischen Eigenschaften der Eichfelder verknüpft.
- Sollte das elektrische Dipolmoment des Neutrons nicht verschwinden, muß der Lagrange-Dichte ein Term

$$\mathcal{L}_\theta = i\theta Q \tag{7.7}$$

hinzugefügt werden, der die P-, T- und CP-Invarianz der starken Wechselwirkung brechen würde (sog. „schweres CP-Problem“). In diesem Fall wird die Dynamik explizit durch die topologische Ladung Q beeinflußt.

- Die erste Ableitung der Fourier-Transformierten des Ladungskorrelators, $C'_{qq}(q^2)$ bei $q^2 = 0$ steht in Verbindung mit dem Proton-Spin, der von den u-, d- und s-Quarks getragen wird [159].

Der Begriff der topologischen Ladung als Pontryagin-Index von Eichfeldern ist rigoros nur im Kontinuum gültig. Es existieren jedoch verschiedene Ansätze, um auch auf dem Gitter einen topologischen Ladungsbegriff einzuführen.

Es sind dabei geometrische, fermionische und gluonische Methoden zu unterscheiden.

7.1.1 Die geometrische Methode der Ladungsbestimmung

Die geometrische Methode [160, 161] rekonstruiert ein Faserbündel aus dem Gittereichfeld und identifiziert die 2. Chern-Nummer, eine topologischen Invariante, des Faserbündels mit der topologischen Ladung. Dieses Verfahren liefert automatisch eine ganzzahlige Ladung, wird heute jedoch eher selten angewendet.

7.1.2 Fermionische Methoden der Ladungsbestimmung

Wie in (4.14) angesprochen, ist nach dem Atiyah-Singer-Index-Theorem [124, 125, 126, 127, 128] die globale topologische Ladung einer Konfiguration allein durch die Nullmoden des Dirac-Operators gegeben (4.14) durch

$$Q = N_0^- - N_0^+ = - \sum_{\lambda_i=0} \sum_x p_{5i}(x), \quad (7.8)$$

wobei N_0^- (N_0^+) die Anzahl der Nullmoden mit negativer (positiver) Chiralität ist.

Auf einer Eichkonfiguration mit topologischer Ladung Q hat der Overlap-Operator somit mindestens $|Q|$ Nullmoden. Bei keiner der von uns verwendeten Konfigurationen sind jedoch bisher Nullmoden des Overlap-Operators mit unterschiedlicher globaler Chiralität aufgetreten, so daß die Anzahl der Nullmoden stets mit der absoluten topologischen Ladung übereinstimmt.

7.1.3 Gluonische Methoden der Ladungsbestimmung

Gluonische Methoden gehen von der Definition (7.1) aus und implementieren den Feldstärketensor auf dem Gitter mittels der Clover-Darstellung. Aufgrund der UV-Fluktuationen auf dem Gitter müssen die Eichfelder jedoch zunächst einem Glättungsvorgang unterworfen werden, bevor die topologische Ladung der Konfigurationen gemessen werden kann.

Das Standard „Cooling“-Verfahren [162, 163, 164, 165] und das APE-Smearing [166, 167] sind dabei die wichtigsten Grund-Varianten, die die Ausgangsbasis für eine Reihe erweiterter und verbesserter Glättungsvorgänge wie das „hypercubic blocking“ [168], „underrelaxed cooling“ [169], „restricted improved cooling“ [170], „inverse blocking“ [62, 171, 172] und „renormalization group cycling“ [173] bilden.

Da diese Methoden dazu neigen, die Eichfelder klassischen Lösungen der Feldgleichungen anzugleichen, können sie die topologische Struktur der Felder verfälschen und sind mit Vorsicht zu verwenden.

7.1.4 Cooling

Bei dem Standard Cooling-Verfahren wird bei jedem Schritt die lokale Wilson-Wirkung, die mit einem einzelnen Link $U_\mu(x)$ assoziiert ist,

$$S_l(x, \mu) = \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} \text{Re Tr} (1 - U_\mu(x) \Sigma_{\mu\nu}(x)) \quad (7.9)$$

minimiert. $\Sigma_{\mu\nu}(x)$ ist hierbei die Summe der folgenden mit $U_\mu(x)$ assoziierten Links in der μ - ν -Ebene (sog. „staples“)

$$\Sigma_{\mu\nu}(x) = U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) + U_\nu^\dagger(x + \hat{\mu} - \hat{\nu}) U_\mu^\dagger(x - \hat{\nu}) U_\nu(x - \hat{\nu}) . \quad (7.10)$$

Der ursprüngliche Link wird hierbei durch den Link $U'_\mu(x)$ ersetzt, der

$$\text{Re Tr} (U'_\mu(x) \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} \Sigma_{\mu\nu}(x)) \quad (7.11)$$

maximiert. Der gängigste Algorithmus zur Minimierung der Wirkung basiert auf dem Pseudo-Wärmebad-Algorithmus von Cabbibo-Marinari [77]. Im Falle der $SU(3)_c$ -Gruppe wird der Algorithmus sukzessive auf die drei $SU(2)_c$ -Untergruppen der $SU(3)_c$ angewendet.

7.1.5 APE-Smearing

Bei dem APE-Smearing-Verfahren werden bei jeder Iteration simultan alle Links $U_\mu(x)$ wie folgt ersetzt

$$U_\mu(x) \longrightarrow U''_\mu(x) = (1 - \alpha) U_\mu(x) + \frac{\alpha}{6} \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} \Sigma_{\mu\nu}^\dagger(x) . \quad (7.12)$$

α ist hierbei ein geeignet zu wählender Parameter.

Da ein derart geschmierter Link nicht mehr ein Element der $SU(3)_c$ -Gruppe ist, muß $U''_\mu(x)$ in die $SU(3)_c$ -Gruppe zurückprojiziert werden. Hierzu wird der ursprüngliche Link $U_\mu(x)$ meist durch den Link $U'_\mu(x)$ ersetzt, der

$$\text{Re Tr} (U'_\mu(x) U''_\mu^\dagger(x)) \quad (7.13)$$

maximiert. Für $\alpha = 1$ ist die Verwandtschaft mit dem Standard Cooling-Verfahren besonders deutlich, da in diesem Fall die Maxima von (7.11) und (7.13) übereinstimmen.

Der wesentliche Unterschied der beiden Verfahren besteht jedoch darin, daß beim APE-Verfahren zunächst alle Links des Gitters via (7.12) ersetzt werden, bevor die modifizierten Links bei der nächsten Iteration berücksichtigt werden, während beim Cooling jede Modifikation eines einzelnen Links beim Update des nächsten Links bereits berücksichtigt wird.

7.1.6 Diskretisierung des Ladungsoperators

Zum Vergleich des fermionischen Verfahrens mit einer gluonischen Methode verwenden wir auf APE-geschmierten Eichfeldern folgende erweiterte Definition [174] des topologischen Ladungsoperators

$$Q_{\text{APE}} = \sum_x \{c_P Q^P(x) + c_R Q^R(x)\} \quad (7.14)$$

mit der diskretisierten topologischen Ladungsdichte (7.1)

$$Q^{P/R}(x) = \frac{1}{32\pi^2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr} (C_{\mu\nu}^{P/R}(x) C_{\rho\sigma}^{P/R}(x)). \quad (7.15)$$

Neben dem quadratischen Clover-Term

$$C_{\mu\nu}^P = \frac{1}{4} \text{Im} \left(\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \right) \quad (7.16)$$

wird von dieser erweiterten Definition auch noch ein Term aus rechteckigen 1×2 -Wilson-Loops

$$C_{\mu\nu}^R = \frac{1}{8} \text{Im} \left(\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \quad (7.17)$$

berücksichtigt.

Durch die spezielle Wahl $c_P = 5/3$ und $c_R = -2/12$ in (7.14) werden für semiklassische Instanton-Konfigurationen die Diskretisierungsfehler auf $\mathcal{O}(a^4)$ reduziert, während sie nur unter Berücksichtigung des Clover-Terms ($c_R = 0$) $\mathcal{O}(a^2)$ sind. Diese Ladung wird nun noch wie in [175, 176] beschrieben multiplikativ und nichtperturbativ renormiert. Der Renormierungsfaktor $Z > 1$ wird hierbei durch Minimierung von

$$\chi^2 = \sum_U \left(Z Q_{\text{APE}}(U) - \text{round}(Z Q_{\text{APE}}(U)) \right)^2 \quad (7.18)$$

bestimmt. Die Maxima von Q_{APE} werden durch die Renormierung ZQ_{APE} zu ganzzahligen Werten verschoben. Die renormierte ganzzahlige Ladung wird durch Rundung

$$Q_{\text{APE}}^{\text{ren}}(U) = \text{round}(Z Q_{\text{APE}}(U)) \quad (7.19)$$

gewonnen.

7.1.7 Vergleich der fermionischen und gluonisch bestimmten Ladung

Die mittels des Indextheorems fermionisch berechneten und auf gluonischem Wege bestimmten Ladungen stimmen nicht exakt überein. Im gluonischen Fall verwenden wir die erweiterte Definition (7.14) auf APE-geschmierten Konfigurationen mit festem $\alpha = 0.68^1$ und unterschiedlicher Anzahl APE-Schritten N_{APE} . Abbildung 7.1 zeigt den Anteil der Konfigurationen, auf denen die gluonisch bestimmte renormierte Ladung von dem Overlap-Index abweicht in Abhängigkeit von der Anzahl der APE-Smearing-Schritte. Auf dem rauhen $12^3 \times 24$ -Gitter mit $\beta = 8.10$ stimmen beide Definitionen am besten überein bei $N_{\text{APE}} = 9$ mit Abweichungen auf 25% aller Konfigurationen, auf dem feineren $16^3 \times 32$ -Gitter mit $\beta = 8.45$ bei $N_{\text{APE}} = 7$ mit Abweichungen auf nur 7% aller Konfigurationen. Bei den Abweichungen handelt es sich fast ausschließlich um Abweichungen beider Definitionen um ± 1 (vgl. auch Abbildung 7.2), während es bei geringerer Zahl von APE-Schritten noch Abweichungen $|\text{round}(ZQ_{\text{APE}}) - Q_{\text{overlap}}| \leq 4$ gibt. Für eine größere Anzahl von APE-Schritten nehmen die Diskrepanzen wieder zu. Im Falle der unrenormierten Ladung sind die Diskrepanzen größer.

Einen Vergleich der Ladungsverteilung der unterschiedlich definierten Ladungen zeigt Abbildung 7.3. Beim Vergleich der ersten beiden Reihen wird deutlich, daß der Renormierungsvorgang die Maxima der Verteilung zu ganzzahligen Werten verlagert. Die in der letzten Reihe gezeigte gerundete renormierte gluonische Ladungsverteilung stimmt annähernd mit der fermionisch bestimmten überein. Im Folgenden soll nur noch letztere betrachtet werden.

¹Die Stärke des APE-Smearings ist effektiv von dem Produkt αN_{APE} abhängig, so daß wir uns hier auf die Diskussion der Abhängigkeit von N_{APE} beschränken können.

7. Die topologische Ladungsdichte

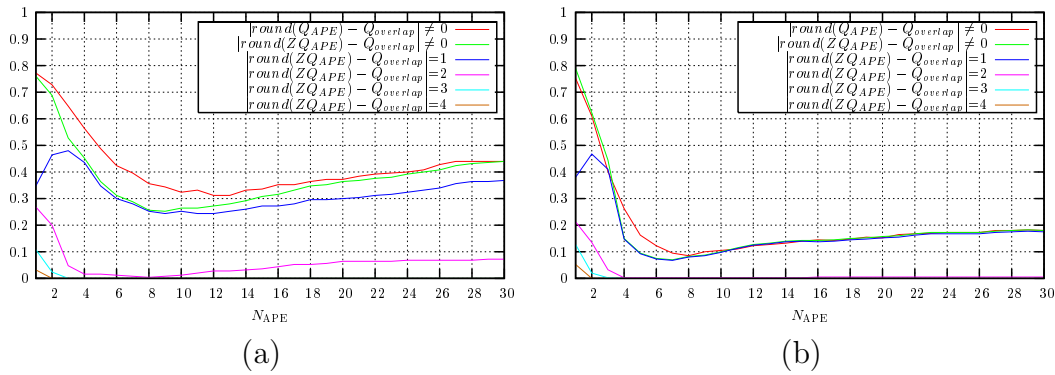


Abbildung 7.1: Gesamtanteil der Konfigurationen, bei denen die gluonisch bestimmte unrenormierte Ladung (rote Kurve) bzw. renormierte Ladung (grüne Kurve) von dem Overlap-Index abweicht in Abhängigkeit von der Anzahl der APE-Smearing-Schritte. Die weiteren Kurven zeigen den Anteil von Abweichungen um $\pm 1, 2, 3$ und 4 . (a) Auf dem rauhen $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ (b) auf dem feineren $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$.

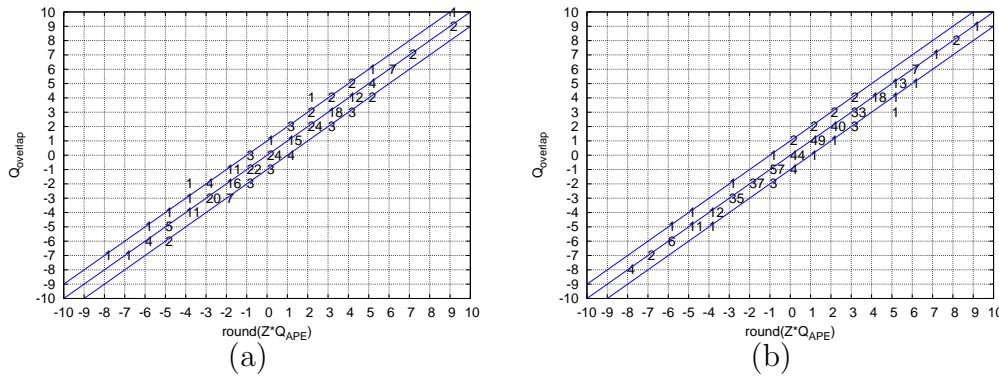


Abbildung 7.2: Vergleich der renormierten gluonischen Ladung mit dem Overlap-Index auf dem $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ (Smearing-Parameter $N_{\text{APE}} = 9$) (a) und dem feineren $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ ($N_{\text{APE}} = 7$) (b). Die Zahlen auf den Gitterpunkten geben die Anzahl von Konfigurationen mit entsprechender Kombination von gluonischer und fermionischer Ladung an.

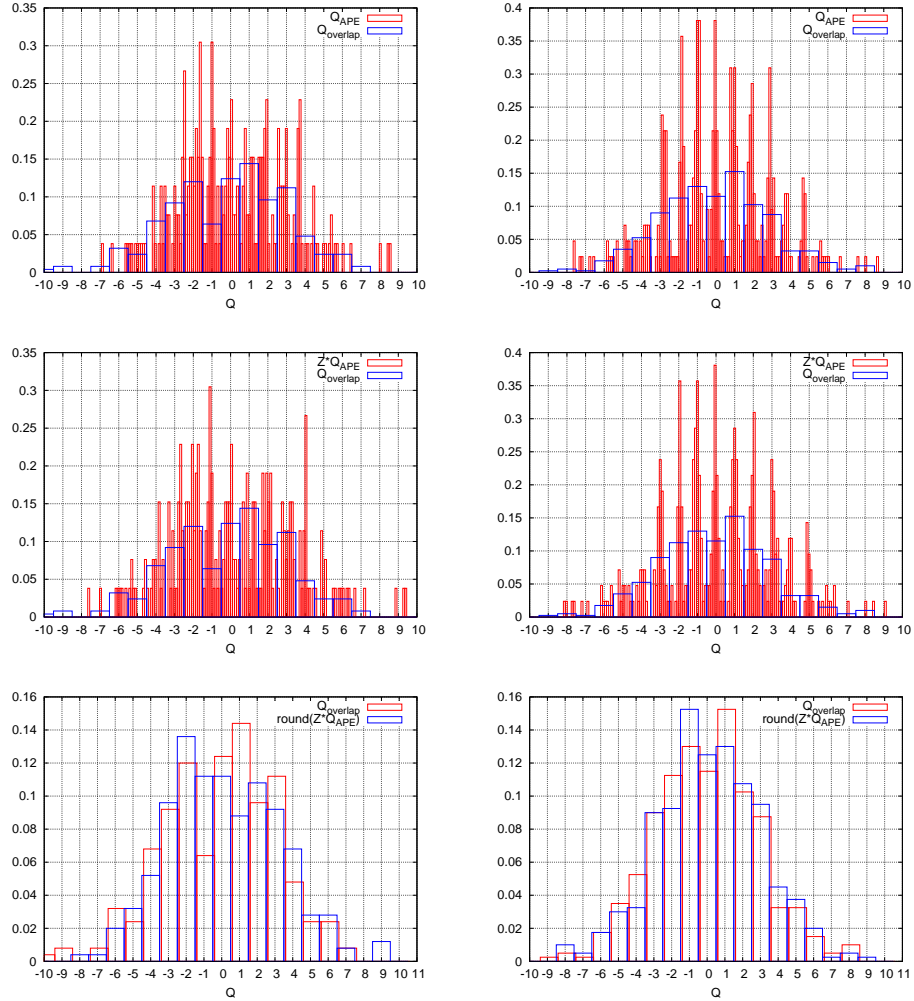


Abbildung 7.3: Vergleich der normierten Verteilung der gluonisch bestimmten topologischen Ladung Q_{APE} (1. Reihe), ZQ_{APE} (2. Reihe) bzw. $\text{round}(ZQ_{APE})$ (3. Reihe) mit der Verteilung der fermionisch bestimmten Ladung $Q_{overlap}$ auf dem rauhen $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ (links) ($N_{APE} = 9$) und dem feineren $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ (rechts) ($N_{APE} = 7$).

7.1.8 Ladungsverteilung und Suszeptibilität der analysierten Ensembles

Die asymptotische Form der Ladungsverteilung für große Volumina folgt einer im Ursprung zentrierten Gauß-Verteilung mit der Varianz $\sigma^2 = \langle Q^2 \rangle$ als einzigem Parameter [177]:

$$P(Q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{Q^2}{2\sigma^2}} (1 + \mathcal{O}(V^{-1})) . \quad (7.20)$$

Abbildung 7.4 zeigt die normierten Ladungsverteilungen aller betrachteten Ensembles zusammen mit Gauß'schen Fits. Im Fall (e) mit höchster Statistik wird die Verteilung besonders gut durch eine Gauß-Kurve beschrieben. Es ist jedoch generell nicht ausgeschlossen, daß die Ladungsverteilung auf dem Gitter bei sehr hoher Statistik Abweichungen von der Gauß-Form aufzeigt [178, 176]. In Tabelle 3.1 ist die topologische Suszeptibilität (7.3) für alle betrachteten Ensembles mit angegeben. Auf den rauheren Konfigurationen mit $\beta = 8.00$ und $\beta = 8.10$ ist die Suszeptibilität etwas größer als auf den feineren Gittern mit $\beta = 8.45$. Trotz recht unterschiedlicher physikalischer Volumina stimmen jedoch innerhalb ihrer Fehler alle Werte überein, sind jedoch alle kleiner als der in [176] angegebene Wert $\chi_{\text{top}} = (193(1)(8)\text{MeV})^4$, wobei dort $r_0 = 0.49$ fm zum Setzen der Skala angewendet wurde.

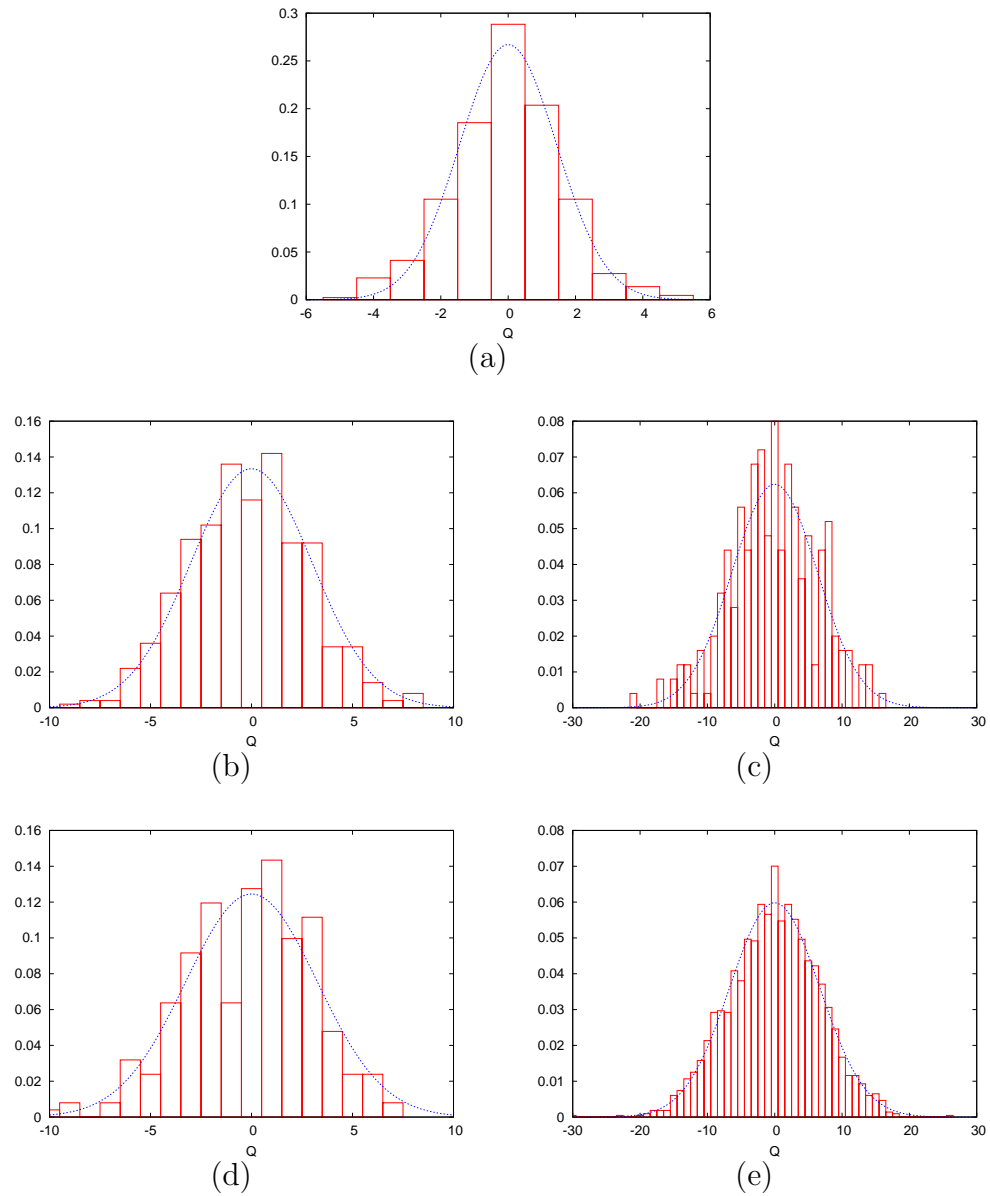


Abbildung 7.4: Normierte Verteilungen der topologischen Ladung Q zusammen mit Gauß'schen Fits für die folgenden Ensembles: (a) $12^3 \times 24$ bei $\beta = 8.45$, (b) $16^3 \times 32$ bei $\beta = 8.45$, (c) $24^3 \times 48$ bei $\beta = 8.45$, (d) $12^3 \times 24$ bei $\beta = 8.10$, (e) $16^3 \times 32$ bei $\beta = 8.00$. Man beachte, daß die Ensembles (b) und (d) bzw. (c) und (e) annähernd gleiches physikalisches Volumen besitzen.

7.2 Die topologische Ladungsdichte

Die lokale topologische Ladungsdichte für jeden γ_5 -hermiteschen Dirac-Operator, der die Ginsparg-Wilson-Gleichung erfüllt, kann nach Hasenfratz, Laliena und Niedermayer [72] wie folgt als Spur über Colour- (C) und Spinor-Indizes (S) ausgedrückt werden:

$$q(x) = -\text{Tr}_{\text{CS}} \left[\gamma_5 \left(1 - \frac{a}{2} D(0; x, x) \right) \right] . \quad (7.21)$$

Zur Berechnung dieser fermionisch definierten topologischen Dichte verwenden wir zwei verschiedene Ansätze [24, 23].

7.2.1 Die volle topologische Dichte $q(x)$

Hierbei wird die Spur des Overlap-Operators direkt nach Gleichung (7.21) berechnet. Dieses Verfahren ist numerisch extrem aufwendig, da hierzu der Overlap-Operator auf insgesamt $12 V_{\text{lat}}$ Einheitsvektoren – auf einem $16^3 \times 32$ -Gitter also insgesamt etwa 1.6 Millionen mal – angewendet werden muß. Diese Dichte enthält Ladungsfluktuationen aller Skalen, d.h. sowohl kurzreichweitige UV-Fluktuationen auf der Skala des Gitter-Cutoffs als auch langreichweitige IR-Fluktuationen auf der Skala von Λ_{QCD} . Sie wird im Rahmen dieser Arbeit als „volle (topologische) Dichte“ bezeichnet und wurde auf den in Tabelle 7.1 gezeigten Ensembles berechnet.

$L_s^3 \times L_t$	β	# Konfig.
$12^3 \times 24$	8.10	53
$16^3 \times 32$	8.45	5
$16^3 \times 32$	8.60	2

Tabelle 7.1: Ensembles und zugehörige Anzahl von Konfigurationen, auf denen die volle Dichte $q(x)$ berechnet wurde.

7.2.2 Die trunkierte topologische Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$

Bei dieser Methode wird die topologische Dichte basierend auf den Eigenmoden des Overlap-Operators berechnet. Unter Verwendung der Spektraldarstellung des verbesserten Overlap-Operators gilt für die trunkierte topologische Dichte

$$q_{\lambda_{\text{cut}}}(x) = - \sum_{|\lambda_i| < \lambda_{\text{cut}}} \left(1 - \frac{\lambda_i}{2}\right) p_{5i}(x) \quad (7.22)$$

mit der pseudoskalaren Dichte $p_{5i}(x)$. Die Trunkierung der Dichte, d.h. die Beschränkung auf nur wenige niedrig liegende Moden $\lambda < \lambda_{\text{cut}}$ agiert als UV-Filter und entfernt kurzreichweitige Fluktuationen der vollen Dichte auf der Skala des Gitter-Cutoffs. Diese Art der Filterung ist eichinvariant und verändert nicht die zugrunde liegenden Eichfelder. Der genaue Einfluß des Cutoffs λ_{cut} auf den Prozeß wird im Folgenden detailliert betrachtet. Die globale, allein durch die Nullmoden gegebene topologische Ladung $Q = \sum_x q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ ist jedoch unabhängig von dem gewählten $\lambda_{\text{cut}} > 0$. Die im Folgenden verwendeten Cutoffs² zusammen mit der mittleren Anzahl von Nichtnullmoden, die unterhalb dieser Cutoffs liegen sind in Tabelle 7.2 dargestellt.

Im Vergleich zur extrem kostspieligen Berechnung der Spur des Overlap-Operators im Falle der vollen topologischen Dichte ist die für die trunkierte Dichte notwendige Berechnung der niedrigen Moden numerisch mit weniger Aufwand verbunden, ist aber gerade auf großen Gittern trotzdem ressourcenfordernd. Sie hat jedoch den Vorteil, daß die Moden auch für die spektrale Darstellung anderer Größen wiederverwendet werden können. Der Filterungsvorgang mit Hilfe von Overlap-Fermionen hat daher in letzter Zeit immer mehr Bedeutung gegenüber Smearing- und Cooling-Techniken gewonnen. Der gewählte Cutoff λ_{cut} ersetzt dabei die Anzahl der Smearing- bzw. Cooling-Iterationen, ohne dabei die Eichfelder zu modifizieren.

Da wir die Struktur der Dichte in Abhängigkeit von $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ untersuchen, sei an dieser Stelle erwähnt, daß der Wert q_{max} leicht von λ_{cut} abhängt und im trunkierten Fall kleiner als im Falle der vollen Dichte ist. Zur Referenz geben wir in Tabelle 7.2 daher auch Mittelwerte des Maximums der verschiedenen Varianten der topologischen Ladungsdichte an.

²Die Cutoff-Werte 200, 400, 600 und 800 MeV auf dem $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ sollten als approximative Werte angesehen werden. Unter Verwendung des interpolierten Gitterabstandes bei $\beta = 8.10$, sind die exakten Werte 195, 389, 584 bzw. 778 MeV.

β	$L_s^3 \times L_t$	$a\lambda_{\text{cut}}$	λ_{cut}	$\langle \# \text{ NNM} \rangle$	$\langle a^4 q_{\text{max}} \rangle$
8.45	$16^3 \times 32$	0.1064	200 MeV	13.1(2)	$3.5(2) 10^{-3}$
		0.2128	400 MeV	36.2(2)	$4.5(2) 10^{-3}$
		0.3374	634 MeV	92.3(2)	$5.4(2) 10^{-3}$
		voll	voll	-	$2.0(1) 10^{-2}$
8.10	$12^3 \times 24$	0.14	200 MeV	11.0(2)	$5.0(1) 10^{-3}$
		0.28	400 MeV	28.1(2)	$6.5(1) 10^{-3}$
		0.42	600 MeV	59.3(2)	$7.7(2) 10^{-3}$
		0.56	800 MeV	117.3(4)	$8.9(1) 10^{-3}$
		voll	voll	-	$2.8(1) 10^{-2}$

Tabelle 7.2: Übersicht der im Rahmen der Untersuchung der topologischen Struktur verwendeten topologischen Ladungsdichten und ihrer mittleren maximalen Dichte $\langle a^4 q_{\text{max}} \rangle$. Für die trunkierten Dichten werden zusätzlich die betrachteten Cutoff-Werte λ_{cut} sowie die jeweilige mittlere Anzahl der Nullmoden $\langle \# \text{ NNM} \rangle$ angegeben, die unterhalb dieser Cutoff-Werte liegen.

7.2.3 Visualisierung der topologischen Ladungsdichte

Isoflächen der topologischen Dichte

Um einen ersten visuellen Eindruck der Unterschiede der trunkierten und vollen topologischen Dichte zu vermitteln, zeigen wir in Abbildung 7.5 Isoflächen der topologischen Ladungsdichte einer typischen Konfiguration des $16^3 \times 32$ -Gitters bei $\beta = 8.45$ auf einer ausgewählten Zeitschicht. Die oberen drei Bildreihen basieren auf der trunkierten Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$, wobei der Cutoff λ_{cut} von der oberen Bildreihe zur unteren von 200 MeV über 400 MeV bis zu 634 MeV ansteigt. Die untere Bildreihe visualisiert die volle Dichte $q(x)$. Es werden jeweils Isoflächen für vier Werte der topologischen Dichte relativ zu der jeweiligen maximalen absoluten Dichte auf dieser Konfiguration gezeigt. Die Farbgebung kodiert das Vorzeichen der Ladung $q(x)/q_{\text{max}} = \pm q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ der Isofläche. Der Cutoff $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ wird von der rechten Spalte mit $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.4$ in Schritten von 0.1 auf $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$ in der linken Spalte herabgesetzt.

Im Fall der vollen Dichte sind bei dem größten Cutoff $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.4$ vereinzelt weit voneinander entfernte kleine Objekte unterschiedlicher Ladung zu erkennen. Beim Herabsenken des Cutoffs kommen zahlreiche unregelmäßig geformte Objekte hinzu, die sich bereits bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.2$ zu zusammenhängenden Clustern verbinden, die teils perkolieren. Bei weiterem Herabsenken des Cutoffs verbinden sich die vorher getrennten Cluster gleichen Vorzeichens und das gesamte Gittervolumen wird bald dicht von zwei komplex ineinander verschränkten eng aneinanderliegenden globalen Strukturen entgegengesetzter Ladung gefüllt.

Ganz anders präsentiert sich die gefilterte topologische Dichte. Hier sind bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.4$ wenige weit entfernte Objekte zu erkennen, deren Anzahl und Größe mit kleiner werdendem $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ systematisch anwächst. Auch bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$ sind die Objekte noch weit voneinander entfernt und besetzen nur einen geringen Teil des Gittervolumens. Erst bei noch kleineren $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ wird auch diese Dichte perkolierendes Verhalten zeigen. Betrachtet man bei festem niedrigem $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ die λ_{cut} -Abhängigkeit, so wird deutlich, daß mit steigendem λ_{cut} die Anzahl und Größe der Objekte systematisch zunimmt. Doch auch bei dem größten analysierten λ_{cut} besteht ein markanter Unterschied zu der Struktur der vollen Dichte. Während die volle Dichte durch zwei globale dicht verschlungene Strukturen charakterisiert wird, zeigen die niedrigen Moden eine komplementäre Struktur des Vakuums, die eher semiklassischen Instanton-Modellen entspricht.

7. Die topologische Ladungsdichte

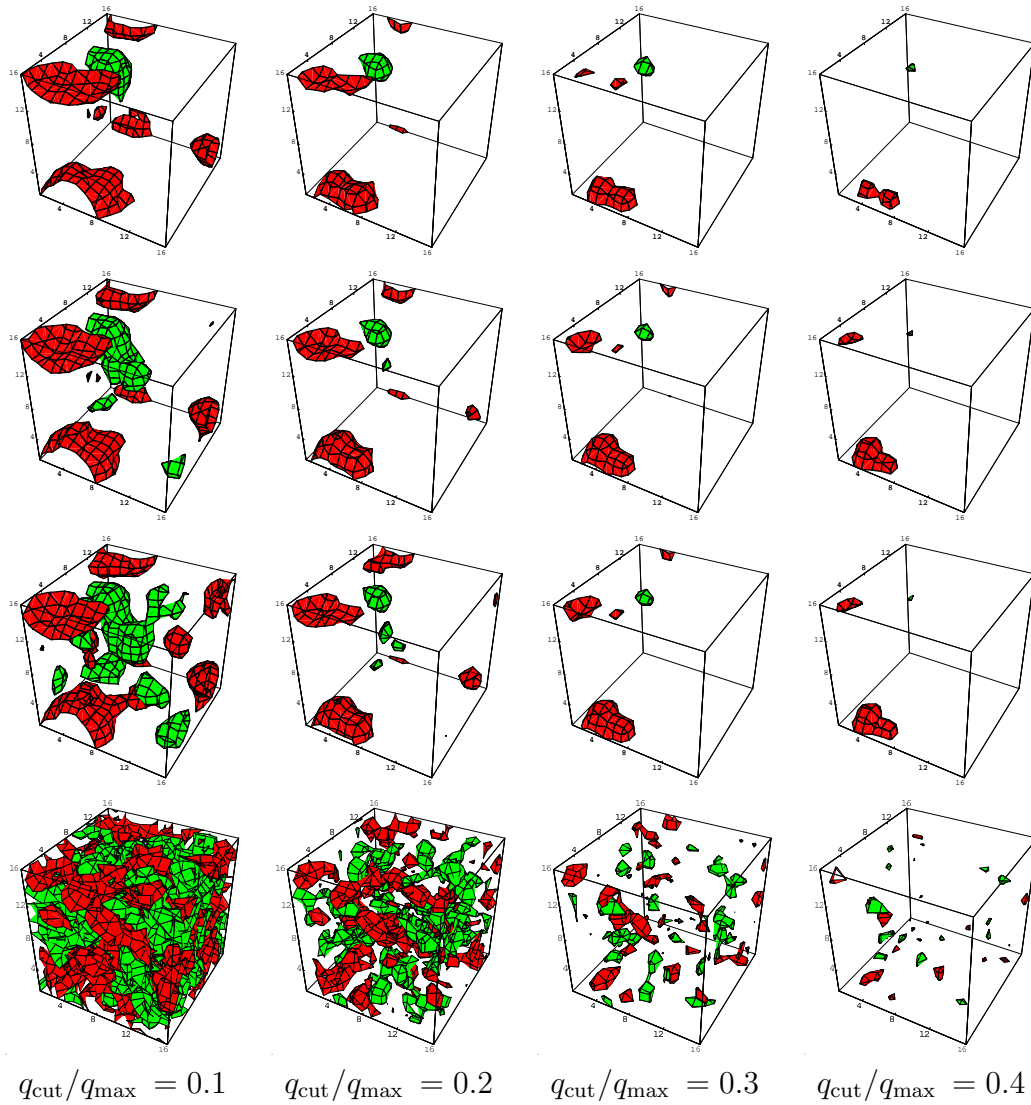


Abbildung 7.5: Isoflächen der topologischen Ladungsdichte mit $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ auf einer ausgewählten Zeitschicht einer typischen $16^3 \times 32$ -Konfiguration bei $\beta = 8.45$. Die ersten drei Bildreihen basieren auf der trunkierten Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ mit $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV (1. Reihe), 400 MeV (2. Reihe) und 634 MeV (3. Reihe). Die 4. Reihe visualisiert die Struktur der vollen Dichte $q(x)$. Die Farbgebung kodiert das Vorzeichen der Ladung der Fläche.

Profile der topologischen Dichte

Eine andere Visualisierung der trunkierten und der vollen Dichte zeigt Abbildung 7.6 für die gleiche Konfiguration, die auch in der zuvor gezeigten Isoflächen-Darstellung Abb. 7.5 und in der Veranschaulichung typischer Eigenmoden Abb. 5.1 verwendet wurde. Dargestellt sind Profile der topologischen Dichte in der x - y -Ebene für festes z und t , wobei die Profile in beiden Richtungen periodisch verdoppelt wurden, um die Erkennbarkeit ausgedehnter Strukturen zu verbessern. In diesem zweidimensionalen Schnitt durch die Ladungsdichte erkennt man, daß mit Erhöhung der „Auflösung“ von $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV auf 400 MeV ein eindimensional ausgedehnter Grat (pro Elementarzelle) sichtbar wird, der bei weiterer Erhöhung von λ_{cut} von 0-dimensionalen Peaks überlagert wird, die das Erkennen der eindimensionalen Struktur jedoch erschweren. Um Substrukturen aufdecken zu können, ist es daher nötig, die Dichte sowohl unter Variation der Auflösung λ_{cut} als auch für verschiedene $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ zu analysieren. Die mit einer um den Faktor 20 größeren Skala dargestellte volle Dichte scheint allein aus rein zufälligen Fluktuationen zu bestehen. Umso erstaunlicher ist es, daß die im nächsten Abschnitt durchgeführte Clusteranalyse auch hier Struktur aufzudecken vermag.

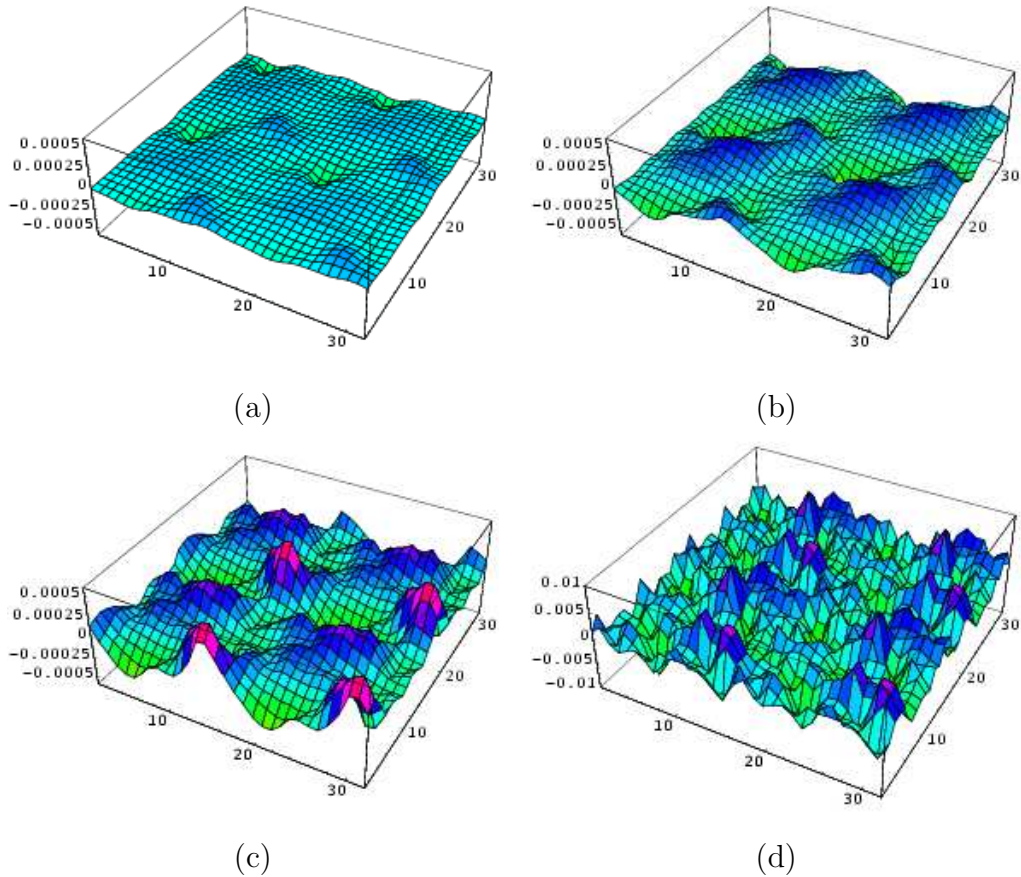


Abbildung 7.6: Profile der topologischen Ladungsdichte in der x - y -Ebene für festes z und t für eine typische $16^3 \times 32$ -Konfiguration bei $\beta = 8.45$ mit $Q = 0$. Um die Erkennbarkeit ausgedehnter Strukturen zu verbessern, wurde die Dichte in beiden Richtungen periodisch verdoppelt. Die Abb. (a) bis (c) zeigen die trunkierte Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ für $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV (a), 400 MeV (b) und 600 MeV (c). Abb. (d) stellt das Profil der vollen Dichte dar (mit einer um den Faktor 20 größeren vertikalen Skala).

7.3 Clusteranalyse der topologischen Dichte

7.3.1 Clusteranalyse der vollen topologischen Dichte

Um die Struktur der topologischen Dichte auf quantitativerem Niveau diskutieren zu können, wurde eine Clusteranalyse der Dichte durchgeführt. Untersucht werden Link-verbundene Vorzeichen-kohärente Cluster der topologischen Dichte mit $|q(x)|/q_{\max} \geq q_{\text{cut}}/q_{\max}$ in Abhängigkeit des normierten Cutoffs $0 \leq q_{\text{cut}}/q_{\max} \leq 0.5$. Hierbei ist q_{\max} die maximale absolute topologische Dichte auf der jeweils untersuchten Konfiguration.

Die in den Abbildungen 7.7–7.9 gezeigten Ergebnisse der Clusteranalyse der vollen topologischen Dichte sollen im Folgenden systematisch diskutiert werden. Sofern nicht anders angegeben, werden die beschriebenen Größen über alle analysierten Konfigurationen gemittelt.

- **Clusterperkolation** (Abb. 7.7 (a))
Perkolation, d.h. $f_{C^{\max 1}}(r_{\max}) > 0$, setzt bei allen drei betrachteten Ensembles bei $q_{\text{cut}}/q_{\max} = 0.2$ ein, unabhängig vom Gitterabstand. Die Wahrscheinlichkeit, daß zwei Gitterpunkte des größten Clusters die maximal mögliche Entfernung haben, steigt für kleinere Cutoffs stark an.
- **Anzahl der Cluster** (Abb. 7.7 (b))
Das Maximum der Clusteranzahl wird etwa bei dem Cutoff erreicht, bei dem Perkolation einsetzt. Bezüglich der Anzahl der Cluster sind die größten Unterschiede zwischen den drei Ensembles festzustellen. So ist die Anzahl der Cluster auf dem feineren $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ etwa um einen Faktor 4 größer als auf dem rauhen $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ mit gleichem physikalischen Volumen. Erstaunlicherweise ist die Anzahl der Cluster auf dem noch feineren $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.60$ innerhalb ihrer aufgrund der sehr geringen Statistik recht großen Fehler nahezu identisch mit der Anzahl auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Die Anzahl der Cluster scheint daher hauptsächlich von dem Volumen in Gittereinheiten abzuhängen.
- **Abstand der beiden größten Cluster $d(C^{\max 1}, C^{\max 2})$ in Gittereinheiten** (Abb. 7.7 (c))
Im nichtperkolierenden Regime sind die beiden größten Cluster weit voneinander entfernt, wobei der in (3.22) definierte Abstand nahezu

konstant ist. Die Unterschiede zwischen den in Gittereinheiten angegebenen Abständen verschwinden nahezu, wenn man das Verhältnis der physikalischen Gitterabstände $a(\beta = 8.10)/a(\beta = 8.45) \approx 1.4$ mit in Betracht zieht. Insbesondere stimmt der Abstand auf dem noch feineren $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.60$ innerhalb der großen Fehler gut mit dem Abstand auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ überein.

Beim Einsetzen der Perkolation schrumpft der Abstand rasch auf den minimalen Abstand $d = 2$. Der Abfall ist auf dem feinen Gitter besonders markant. Auf dem rauheren Gitter sind die Clustereigenschaften stets etwas „verwaschener“. Die beiden Cluster entgegengesetzten Vorzeichens sind im perkolierenden Bereich extrem dünn (mit einer Dicke $\mathcal{O}(a)$) und überall auf dem Gitter dicht benachbart. Wie die Visualisierungen der Dichte bereits gezeigt haben, sind die beiden Cluster auf sehr komplizierte Weise dicht ineinander verschlungen.

- **Packungsdichte der Cluster $V_{\text{cluster}}/V_{\text{lat}}$** (Abb. 7.7 (d))
 Die Packungsdichte ist der Anteil der Punkte des Gittervolumens V_{lat} , die Teil eines Clusters sind. Der Anstieg der Packungsdichte der Cluster beginnt bereits bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.4$, also zusammen mit dem starken Anwachsen der Anzahl der Cluster, weit vor dem Einsetzen der Perkolation. Die Packungsdichte ist auf den feineren Gittern etwas größer als auf dem rauhen $12^3 \times 24$ -Gitter. Im perkolierenden Regime wird sie durch das Volumen der beiden größten Cluster bestimmt.
- **Fraktionales Volumen der beiden größten Cluster C^{max1} und C^{max2}** (Abb. 7.8 (e),(f))
 Bereits kurz vor dem Einsetzen der Perkolation beginnt sich das fraktionale Volumen der beiden größten Cluster von dem mittleren Volumen der restlichen Cluster zu unterscheiden. Beim Einsetzen der Perkolation wächst das fraktionale Volumen beider Cluster nahezu linear an, um bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0$ jeweils 50% des Gesamtvolumens zu betragen. Die beiden verschränkten größten Cluster füllen hier das gesamte Gittervolumen aus.
- **Fraktionales Clustervolumen der beiden größten Cluster C^{max1} und C^{max2}** (Abb. 7.8 (g),(h))
 Das fraktionale Clustervolumen ergibt sich aus der Division des fraktionales Volumens durch die Packungsdichte und fungiert daher hier nur als zusätzliche Veranschaulichung der Volumina. Mit dem starken Anstieg der Anzahl der Cluster und der Packungsdichte bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.4$ nimmt das fraktionale Clustervolumen zunächst ab. Das bemerk-

kenswerte ist jedoch der sehr rapide Anstieg – besonders auf den feinen Gittern – des fraktionalen Clustervolumens mit dem Einsetzen der Perkolation auf 50%. Bereits kurz nach dem Einsetzen der Perkolation füllen die beiden größten Cluster also nahezu komplett das Clustergesamt volumen aus.

- **Fraktionales Clustervolumen aller Cluster** (Abb. 7.9)

Um die Unterschiede zwischen perkolierendem und nichtperkolierendem Regime noch weiter zu verdeutlichen, zeigt Abbildung 7.9 fraktionales Clustervolumen und Ladung aller Cluster bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$ und $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.3$ auf der schon oft verwendeten Beispielkonfiguration mit Ladung $Q = 0$. Die Cluster sind hierbei nach ihrem fraktionalen Volumen sortiert. Im nichtperkolierenden Bereich existiert eine Vielzahl kleiner Cluster mit zufälligem Ladungsvorzeichen, deren kleine absolute Ladung proportional zur Größe der Cluster anwächst. Im perkolierenden Bereich wird das Gitter durch zwei in etwa gleichgroße nahezu das gesamte Clustervolumen ausfüllende Cluster dominiert, deren entgegengesetzte sehr große Clusterladungen $-q(C^{\text{max1}}) = q(C^{\text{max2}}) \approx 113$ sich kompensieren. Im Fall einer Konfiguration mit $Q \neq 0$ ist es die kleine Differenz der sehr großen Ladungen der beiden dominierenden Cluster, die die globale Ladung Q der Konfiguration bestimmt.

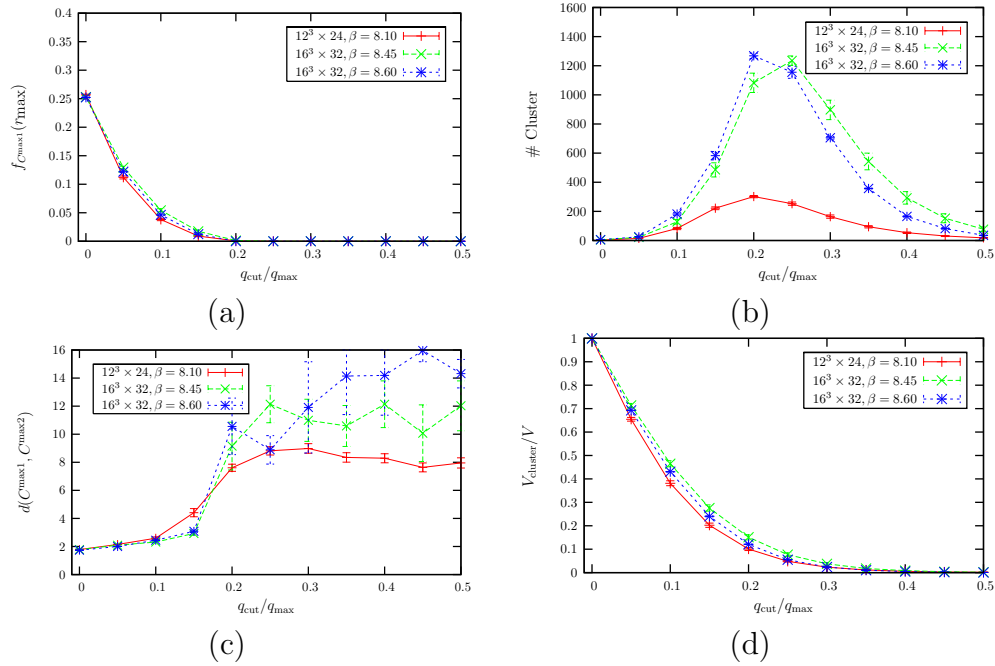


Abbildung 7.7: Ergebnisse der Clusteranalyse der vollen topologischen Dichte für die in Tabelle 7.1 gezeigten drei Ensembles (I). Gezeigt wird die $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ -Abhängigkeit für folgende gemittelte Größen: (a) Clusterperkolations, (b) die Anzahl der Cluster, (c) der Abstand der beiden größten Cluster in Gittereinheiten und (d) die Packungsdichte der Cluster.

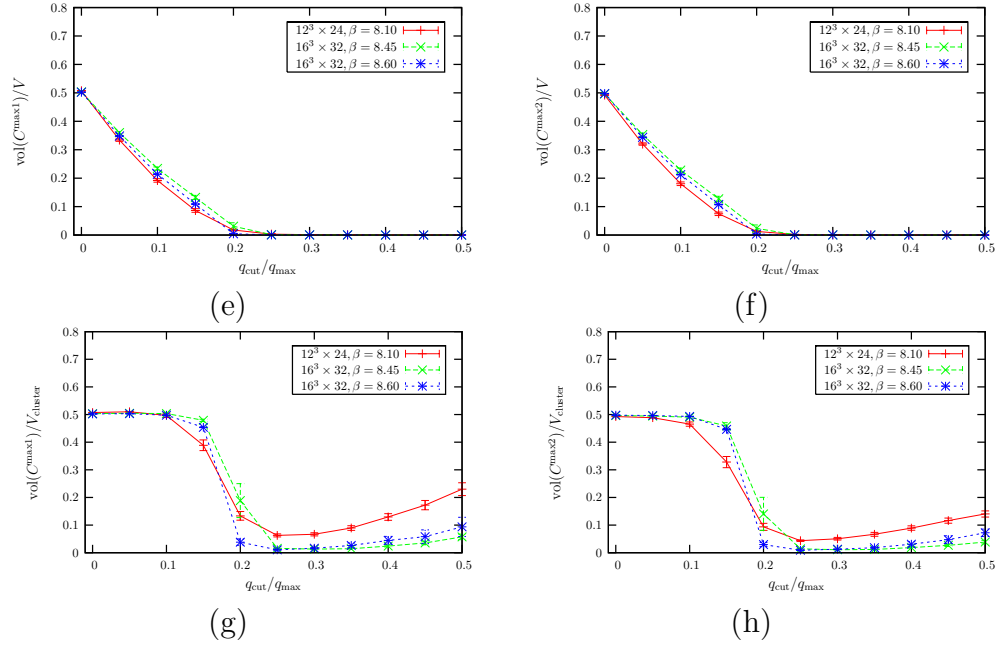


Abbildung 7.8: Ergebnisse der Clusteranalyse der vollen topologischen Dichte für die in Tabelle 7.1 gezeigten drei Ensembles (II). Gezeigt wird die $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ -Abhängigkeit für folgende gemittelte Größen: fraktionales Volumen des größten (e) bzw. des zweitgrößten Clusters (f) und fraktionales Clustervolumen des größten (g) bzw. des zweitgrößten Clusters (h).

7. Die topologische Ladungsdichte

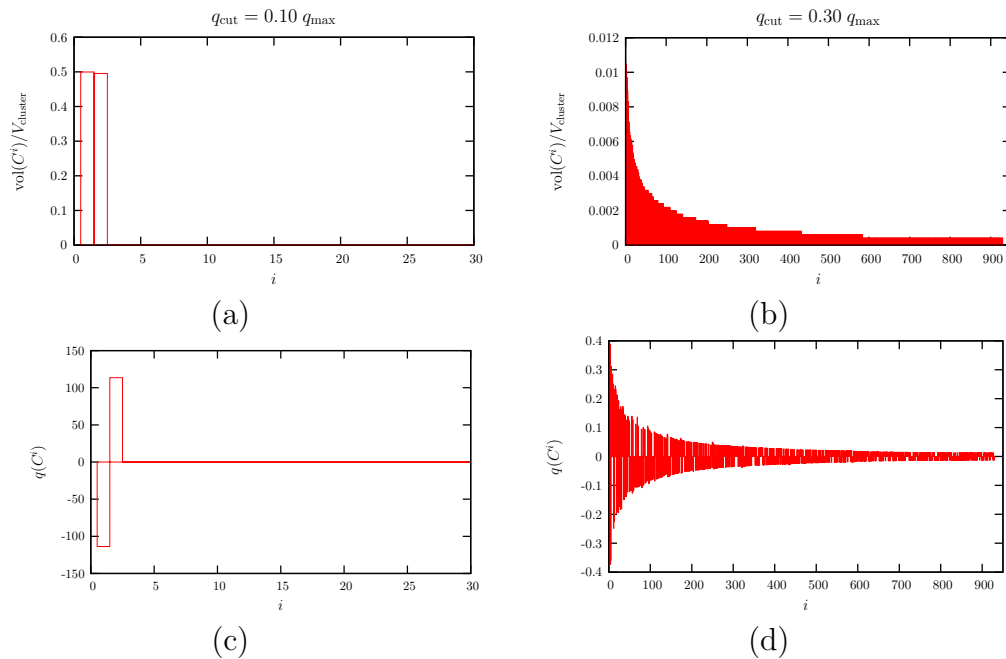


Abbildung 7.9: Ergebnisse der Clusteranalyse der vollen topologischen Dichte für eine typische Konfiguration auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Gezeigt wird in der oberen Bildreihe das fraktionale Clustervolumen der Cluster und in der unteren Reihe deren topologische Ladung für zwei verschiedene Cutoffs $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.10$ (linke Spalte) und 0.30 (rechte Spalte).

7.3.2 Clusteranalyse der trunkierten Dichte

Die Abbildungen 7.10–7.12 zeigen die Ergebnisse einer Clusteranalyse der trunkierten Dichte im Vergleich zu den Eigenschaften der vollen Dichte sowohl auf dem rauheren $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ (linke Abbildungen) als auch auf dem feineren $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ mit nahezu gleichem physikalischen Volumen (rechte Abbildungen).

Wir diskutieren die Eigenschaften systematisch analog zu Abschnitt 7.3.1.

- **Clusterperkolation** (Abb. 7.10 (a))

Mit äußerst geringer Wahrscheinlichkeit beginnt die Perkolation der trunkierten Dichte wie die der vollen Dichte bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.2$. Erst bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$ wird die Wahrscheinlichkeit, daß zwei Gitterpunkte des größten Clusters der trunkierten Dichte die maximal mögliche Entfernung haben signifikant, sie ist jedoch für $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} > 0$ – vor allem auf dem feinen Gitter – stets deutlich geringer als im Falle der vollen Dichte.

- **Anzahl der Cluster** (Abb. 7.10 (b))

Die Anzahl der Cluster der trunkierten Dichte ist wesentlich kleiner als die der vollen Dichte. Man beachte die am rechten Rand der Abbildungen (b1) und (b2) gezeigte Skala der vollen Dichte. Im trunkierten Fall wächst die Anzahl der Cluster mit dem Cutoff λ_{cut} , wobei die Anzahl der Cluster auf dem feinen Gitter bei festem Cutoff λ_{cut} stets größer ist als auf dem rauhen $12^3 \times 24$ -Gitter. Die Anzahl der Cluster bei festem λ_{cut} ist somit stark diskretisierungsabhängig. Das Maximum auf dem feinen Gitter liegt wesentlich weiter bei kleinerem λ_{cut} als im Fall der vollen Dichte. Die Position entspricht dem Einsetzen der signifikanten Perkolation.

- **Abstand der beiden größten Cluster $d(C^{\text{max1}}, C^{\text{max2}})$ in Gittereinheiten** (Abb. 7.10 (c))

Im nichtperkolierenden Bereich ist der Abstand der beiden größten Cluster der trunkierten Dichte in etwa gleich dem der beiden größten Cluster der vollen Dichte. Der Abstand bleibt über einen breiten Bereich nahezu konstant, auch beim Einsetzen der Perkolation fällt er nicht wie im Fall der vollen Dichte rasch auf den minimalen Abstand ab, sondern erreicht, umso langsamer je kleiner λ_{cut} ist, bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0$ schließlich einen minimalen Abstand. Dieser ist bei dem kleinsten λ_{cut} fast dreimal so groß wie der Abstand der beiden Cluster der vollen Dichte. Die

beiden größten Cluster sind also stets deutlich voneinander getrennt.

- **Packungsdichte der Cluster $V_{\text{cluster}}/V_{\text{lat}}$** (Abb. 7.11 (d))
 Unabhängig von λ_{cut} beginnt der Anstieg der Packungsdichte im trun-
 kierten Fall – vor allem auf dem feinen Gitter – erst bei wesentlich
 kleinerem $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ als im Fall der vollen Dichte. Je kleiner λ_{cut} , desto
 kleiner ist auch die Packungsdichte.
- **Fraktionales Volumen der beiden größten Cluster C^{max1}
 und C^{max2}** (Abb. 7.11 (e),(f))
 Auf dem rauhen Gitter ist der Anstieg des fraktionalen Volumens der
 beiden größten Cluster der trunkierten Dichte tendenziell vergleichbar
 mit dem Verhalten im Fall der vollen Dichte, besonders für große λ_{cut} .
 Auf dem feinen $16^3 \times 32$ -Gitter sind die Unterschiede zur vollen Dichte
 auch bei größtem λ_{cut} wesentlich markanter. Der lineare Anstieg des
 fraktionalen Volumens im Fall der vollen Dichte wird nicht annähernd
 erreicht.
- **Fraktionales Clustervolumen der beiden größten Cluster C^{max1}
 und C^{max2}** (Abb. 7.12 (g),(h))
 In dieser Sichtweise werden die Unterschiede zur vollen Dichte be-
 sonders deutlich. Auf beiden Gittern ist das fraktionale Clustervolu-
 men auch beim Übergang in den perkolierenden Bereich nahezu kon-
 stant. Der Anstieg der Anzahl der Cluster bei mittleren $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ führt
 lediglich zu einem leichten Abfall des fraktionalen Clustervolumens.
 Das fraktionale Clustervolumen des größten Clusters ist im gesamten
 $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ Bereich – besonders für hohe λ_{cut} – deutlich größer als das des
 zweitgrößten.

Im Gegensatz zu der vollen Dichte zeigt die trunkierte Dichte mit einer je
 nach λ_{cut} variierenden mittleren Anzahl von 0.6–1.9 ($12^3 \times 24$) bzw. 0.9–
 2.6 ($16^3 \times 32$) deutlich separierten Clustern pro fm^4 Ähnlichkeiten mit dem
 semiklassischen Instantongas-Modell. Die Dimension der Cluster ist jedoch
 stets ≤ 3 -dimensional, wie die Dimensionsanalyse des folgenden Abschnittes
 zeigen wird.

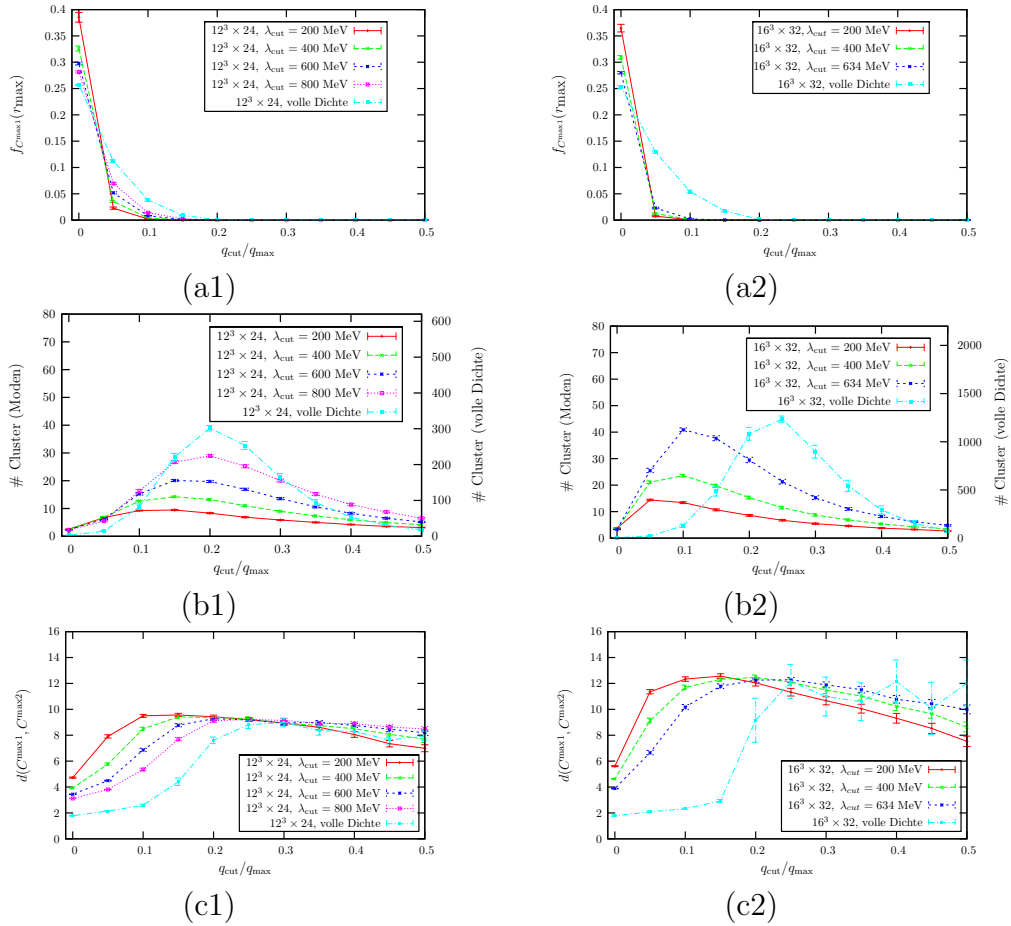


Abbildung 7.10: Ergebnisse der Clusteranalyse der trunkierten Dichte für verschiedene Cutoffs λ_{cut} im Vergleich zu den Clustereigenschaften der vollen Dichte (I). Die linke Bilderspalte zeigt den Vergleich für das raue $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$, die rechte für das feinere $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Gezeigt wird die $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ -Abhängigkeit für folgende gemittelte Größen: (a) Clusterperkolations, (b) die Anzahl der Cluster, (c) der Abstand der beiden größten Cluster in Gittereinheiten.

7. Die topologische Ladungsdichte

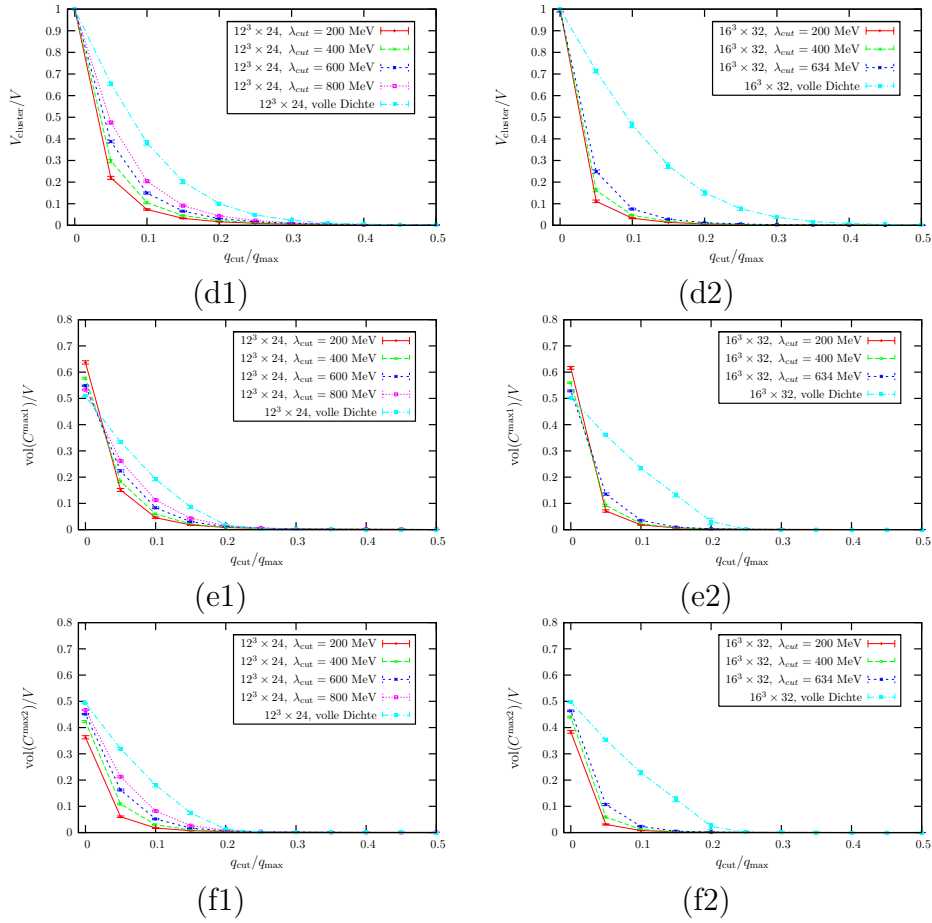


Abbildung 7.11: Ergebnisse der Clusteranalyse der trunkierten Dichte für verschiedene Cutoffs λ_{cut} im Vergleich zu den Clustereigenschaften der vollen Dichte (II). (d) Die Packungsdichte der Cluster und das fraktionale Volumen des größten (e) bzw. des zweitgrößten Clusters (f).

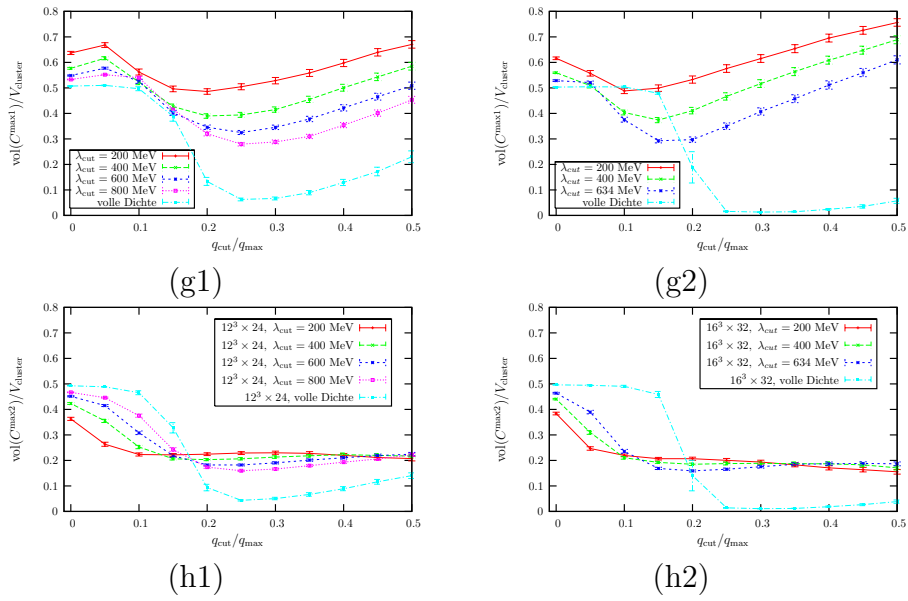


Abbildung 7.12: Ergebnisse der Clusteranalyse der trunkierten Dichte für verschiedene Cutoffs λ_{cut} im Vergleich zu den Clustereigenschaften der vollen Dichte (III). Das fraktionale Clustervolumen des größten (g) bzw. des zweitgrößten Clusters (h).

7.3.3 Dimension der topologischen Dichte

Zur Analyse der Multifraktalität der topologischen Dichte wurde sowohl die Random-Walk-basierte Methode als auch die Methode der überdeckenden Sphäre verwendet.

Zur Veranschaulichung zeigt Abbildung 7.13 für verschiedene $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ die Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Random-Walks zum Zentrum x_c^{max1} des größten Clusters der vollen topologischen Dichte als Funktion der Anzahl der zurückgelegten Schritte τ . Verwendet wurde das $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$.

Der Abfall der Wahrscheinlichkeit hängt stark von dem gewählten Cutoff ab. Die eingezeichneten Fits an Gleichung (3.31) liefern fraktale Dimensionen, die von $d^* = 2.7$ bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.0$ tief im perkolierenden Bereich über $d^* = 1.1$ bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.2$ beim Einsetzen der Perkolations bis zu $d^* = 0.7$ bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.3$ im nichtperkolierenden Regime reichen. Bei weiter erhöhtem Cutoff haben die Spitzen der topologischen Dichte eine zu geringe Ausdehnung, als daß sich die Random-Walker in bestimmten Richtungen frei bewegen könnten. Die effektive Dimension fällt somit auf 0 ab.

Die auf diesem Wege bestimmten Dimensionen auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ und dem $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ sind im Anhang in Tabelle A.1 aufgeführt und in Abbildung 7.14 für die volle Dichte und die trunkierte Dichte mit kleinstem λ_{cut} gezeigt. Im trunkierten Fall ist die Dimension vor allem bei kleinen $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ deutlich größer als im Fall der vollen Dichte, die Random-Walker können sich hier in regulär geformten Gebieten, die durch die Isoflächen-Darstellung visualisiert wurden, in mehr Richtungen frei bewegen.

Abbildung 7.15 zeigt die kumulierte volle Ladungsdichte $q_{\text{cum}}(r)$ des größten Clusters auf den beiden betrachteten Gittern. Die durch Fits an Gleichung (3.25) berechneten Dimensionen sind im Anhang in A.2 tabellarisiert. Bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$ ergibt der Fit auf dem $12^3 \times 24$ bzw. $16^3 \times 32$ -Gitter ein Potenzverhalten von $q_{\text{cum}}(r) \sim r^{3.1}$ bzw. $r^{3.3}$. Auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter, bei dem auch das Einsetzen der Perkolations leicht zu höheren $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ verschoben ist, kann der Anstieg bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.20$ durch $r^{2.5}$ gefittet werden, während er auf dem rauheren bereits linear ist. Ist lediglich ein linearer Fit möglich, wird die Dimension im Anhang als $d^* = 1$ angegeben. Die mit dieser Methode ermittelten Dimensionen der topologischen Dichte sind tendenziell größer als die mit dem Random-Walk-Verfahren bestimmten, zeigen aber einen markanten Unterschied zwischen perkolierendem und nichtperkolierendem Regime.

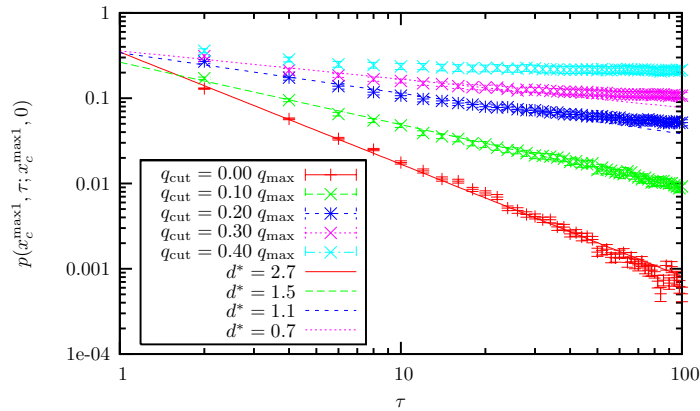


Abbildung 7.13: Die Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Random-Walks zum Zentrum $x_c^{\max 1}$ des größten Clusters der vollen topologischen Dichte $q(x)$ für das $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ als Funktion der Anzahl der von den Random-Walkern zurückgelegten Schritte für verschiedene $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$. Die durch Fits an Gleichung (3.31) berechneten effektiven Dimensionen d^* sind in der Legende als Beschriftung der Fitgeraden aufgeführt.

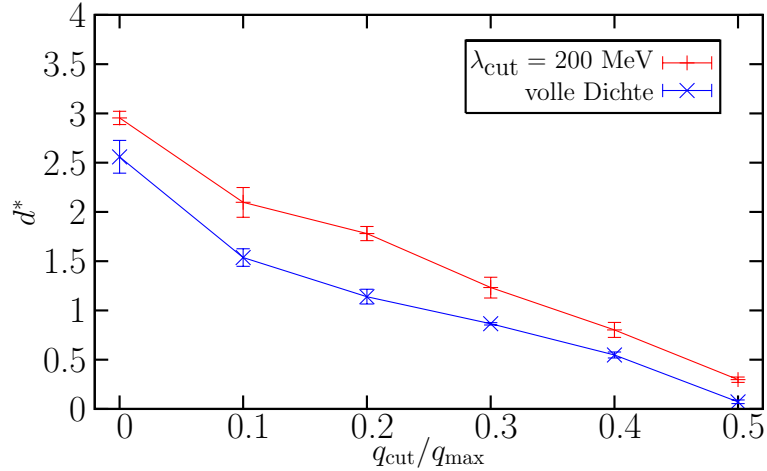


Abbildung 7.14: Mit der Random-Walk-basierten Methode bestimmte effektive Dimension d^* des größten Clusters als Funktion des Cutoffs $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$. Die Dimension wird für die volle Dichte $q(x)$ und die trunkierte Dichte mit $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV für das $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ und das $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ gezeigt.

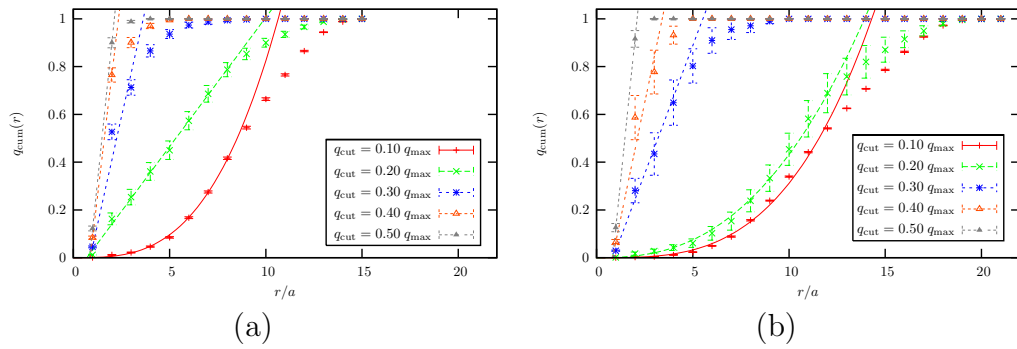


Abbildung 7.15: Bestimmung der Dimension des größten Clusters der vollen topologischen Dichte anhand der Methode der überdeckenden Sphäre für fünf verschiedene Cutoffs $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$. Eingezeichnet ist die kumulierte Ladung $q_{\text{cum}}(r)$ des größten Clusters innerhalb einer Kugel um das Maximum dieses Clusters in Abhängigkeit des Kugelradius r/a für das $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ (links) und das $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ (rechts).

7.4 Der topologische Ladungskorrelator

Der topologische Ladungskorrelator ist formal wie folgt definiert

$$C_{qq}(r) = \frac{\sum_{x,y} \langle q(x) q(y) \rangle \delta(r - |x - y|)}{\sum_{x,y} \delta(r - |x - y|)} . \quad (7.23)$$

Als Vakuumerwartungswert ist er nur eine Funktion des Abstandes, um Rotationsinvarianz im Euklidischen zu gewährleisten.

Die stets positive topologische Suszeptibilität (7.3), die als Integral des Ladungskorrelators

$$\chi = \int dr C_{qq}(r) \geq 0 \quad (7.24)$$

geschrieben werden kann, würde erwarten lassen, daß auch dieser positiv ist.

Aufgrund der pseudoskalaren Natur der topologischen Dichte verhält sich diese unter Zeitreflexionen gemäß

$$\Theta q(x) = -q(\Theta x) . \quad (7.25)$$

Das Axiom der Reflexionspositivität (1.35) verlangt daher, daß der Korrelator im Euklidischen für positive Abstände negativ wird, wie in [179] betont wurde:

$$C_{qq}(r) \leq 0 \text{ für } r > 0 . \quad (7.26)$$

Um diese beiden paradox erscheinenden Forderungen in Einklang zu bringen, müssen in der euklidischen Theorie formal divergente Terme der Form

$$C_{qq}(x) \rightarrow C_{qq}(x) + c_1 \delta(x) + c_2 \Delta \delta(x) + c_3 \Delta^2 \delta(x) \quad (7.27)$$

hinzugefügt werden [180]. Derartige Kontaktterme tragen nicht zur analytischen Fortsetzung vom euklidischen Raum zurück in den Minkowski Raum bei.

Auf dem Gitter gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten der Zeitreflexion (vgl. [181]). Stimmt die Projektionsebene mit einer Gitterebene, z.B. $x_4 = 0$, überein so gilt unter Zeitreflexion $x_4 \rightarrow -x_4$ („site reflection“), liegt sie zwischen zwei Gitterebenen, z.B. bei $x_4 = 1/2$, gilt $x_4 \rightarrow 1 - x_4$ („link reflection“). Reflexionspositivität verlangt dann, daß $\langle (\Theta F) F \rangle \geq 0$ für beliebige Funktionen

der betrachteten Operatoren mit $x_4 \geq 0$ im ersten bzw. $x_4 \geq 1$ im zweiten Fall gilt.

Selbst falls $q(x)$ ultralokal mit in Gittereinheiten gegebenem Lokalisierungsradius r_{\max} wäre, kann strikte Reflexionspositivität nicht allgemein erfüllt sein, da für $r < 2 r_{\max} = r_k$ der Operator sich über die Projektionsebene hinweg ausdehnt. Für diese Abstände erwartet man daher, daß der Korrelator einen positiven Kern der Größe r_k hat und erst für größere Abstände die theoretisch geforderte Negativität zeigt [182]. Der Kernbereich in physikalischen Einheiten ar_k sollte im Kontinuums-Limes gegen Null gehen, um die Reflexionspositivität im euklidischen Kontinuum zu gewährleisten.

Im Falle von Overlap-Fermionen ist die Wirkung nicht ultralokal, so daß formal die Reflexionspositivität nicht streng erfüllt werden kann. Da die effektive Reichweite (3.7) des Overlap-Operators auf unseren Konfigurationen exponentiell verschwindet, sollte die Korrelationsfunktion jedoch auch hier einen positiven Kern mit einem anschließenden negativen Part zeigen. Beim Übergang zu kleineren Gitterabständen ist zu erwarten, daß die Ausdehnung des positiven Kernbereichs abnimmt. Um die Positivität der chiralen Suszeptibilität zu gewährleisten, muß die Korrelation bei $r = 0$ anwachsen und die zunehmende Negativität kompensieren. Da die Kontinuums-Definition (7.1) ebenso wie perturbative Betrachtungen nahelegen, daß $q(x)$ ein Operator der Massendimension vier ist, erwartet man unter Vernachlässigung logarithmischer Terme eine starke Divergenz der Ordnung $\mathcal{O}(r^{-8})$ für $r \rightarrow 0$ [180].

Die Korrelationsfunktion spiegelt somit die Güte der Lokalisierungseigenschaften des Overlap-Operators wider. Ihre Betrachtung kann jedoch in dem verdünnten Instanton-Gas auch anders motiviert werden [183]. In diesem Modell ist die Korrelation bei $r = 0$ proportional zu der Anzahl topologischer Objekte, während die Breite die mittlere Größe ρ dieser Objekte widerspiegelt. Falls diese Objekte räumlich nicht korreliert sind, sollte der Korrelator für größere Abstände $r > 2\rho^2$ verschwinden, bei einer Paarung gegenseitig geladener Objekte jedoch negativ werden und bei $r \approx 2\rho$ ein Minimum zeigen.

Abbildung 7.16 zeigt die Korrelationsfunktion der vollen topologischen Ladungsdichte für die drei Ensembles in Tabelle 7.1. Auf dem rauhen Gitter bei $\beta = 8.10$ ist die maximale Anzahl der Cluster wohl zu gering und andere Clustereigenschaften zu verwaschen, um den Korrelator negativ werden zu lassen. Beim Übergang zu $\beta = 8.45$ wird die Korrelationsfunktion bei $r \approx 2a$ negativ und reflektiert zum einen die verschränkte globale Struktur der topologischen Dichte und zum anderen die sehr große Zahl irregulärer Cluster

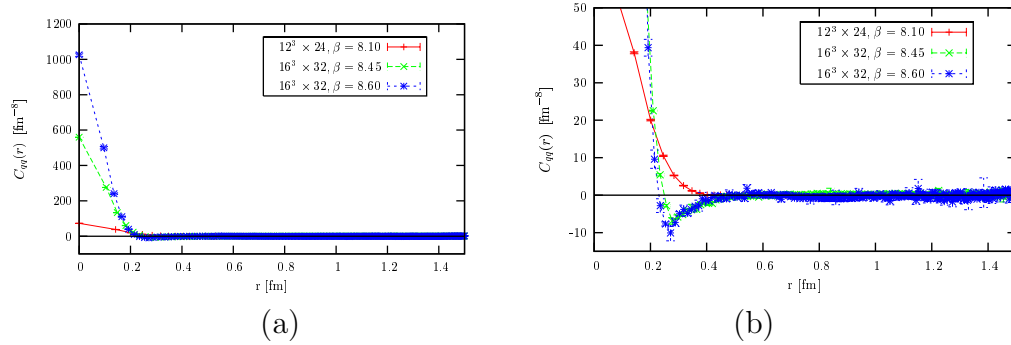


Abbildung 7.16: Vergleich der Korrelationsfunktion der vollen Ladungsdichte $q(x)$ auf drei Ensembles mit unterschiedlichem β in Abhängigkeit von r [fm]. Das rechte Bild vergrößert den Bereich, in dem die Korrelationsfunktionen für genügend große β -Werte negativ werden.

der vollen Dichte beim Einsetzen der Perkolation. Um die stärker werdende Negativität zu kompensieren, steigt die Korrelation bei $r = 0$ an und gewährleistet die in Tabelle 3.1 bereits gezeigte innerhalb der Fehler übereinstimmende topologische Suszeptibilität. Beim Übergang zu dem noch größerem $\beta = 8.60$ steigt die positive Korrelation bei $r = 0$ stark an, die Ausdehnung des positiven Kerns nimmt jedoch nur geringfügig ab und spiegelt die Lokalisierungseigenschaften des Overlap-Operators wider.

Die Korrelationsfunktionen für die trunkeerte Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ sind in Abbildung 7.17 für verschiedene Cutoffs λ_{cut} auf dem $12^3 \times 24$ -Gitter bei $\beta = 8.10$ gezeigt. Man erkennt, daß die Korrelation bei $r = 0$ mit steigendem λ_{cut} mit der Anzahl der Cluster steigt. Bei dem kleinsten Cutoff $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV ist keine Negativität des Korrelators zu erkennen, mit zunehmendem λ_{cut} wird der Korrelator jedoch negativ und der positive Kernbereich verkleinert sich. Da die globale topologische Ladung allein durch die Nullmoden gegeben ist, die für alle betrachteten λ_{cut} zur trunkeerten Dichte beitragen, ist die topologische Suszeptibilität unabhängig von dem gewählten Cutoff λ_{cut} und der negative Part des Korrelators muß exakt durch den Anstieg von $C_{qq}(0)$ kompensiert werden. Bei genügend hohem λ_{cut} reflektiert die Korrelationsfunktion die zunehmende Paarung entgegengesetzter Cluster.

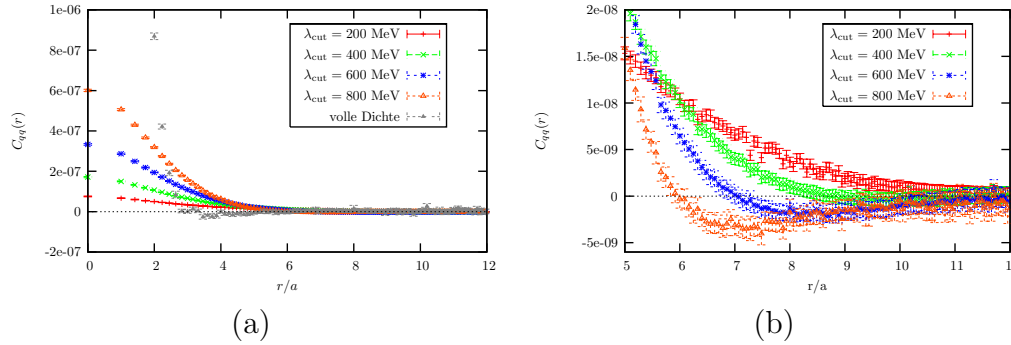


Abbildung 7.17: Die Korrelationsfunktion $C_{qq}(r)$ der topologischen Ladungsdichte auf dem $12^3 \times 24$ -Gitter mit $\beta = 8.10$ in Abhängigkeit von r/a . Das linke Bild (a) vergleicht die über alle Konfigurationen gemittelte trunkierte Ladungsdichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ für vier verschiedene Cutoffs λ_{cut} mit der über 53 Konfigurationen gemittelten vollen Dichte $q(x)$. Das rechte Bild vergrößert den Bereich, in dem die Korrelationsfunktionen der trunkierten Ladungsdichten für genügend hohe Cutoffs λ_{cut} negativ werden.

7.5 Korrelation der lokalen Chiralität und der trunkierten topologischen Dichte

Bevor wir die Diskussion der topologischen Dichte abschließen, sei in Abbildung 7.18 noch die Korrelationsfunktion

$$C_{qX}(r; \lambda_{\text{cut}}, i) = \frac{\sum_{x,y} \langle q_{\lambda_{\text{cut}}}(x) X_i(y) \rangle \delta(r - |x - y|)}{\sum_{x,y} \delta(r - |x - y|)} \quad (7.28)$$

der trunkierten topologischen Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ mit $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV und der lokalen Chiralität $X_i(x)$ der i -ten Nichtnullmode auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ gezeigt. Nach Tabelle 7.2 wird diese topologische Dichte im Mittel aus ca. 13 Nichtnullmoden konstruiert.

Die Abbildung demonstriert, daß die Korrelation der durch den kollektiven Beitrag der niedrigsten 13 Moden definierten trunkierten Dichte mit der individuellen lokalen Chiralität der ersten 10 Nichtnullmoden besonders stark ist. Die positive Korrelation reicht über einen Abstand von 10 Gittereinheiten (≈ 1 fm) und geht für größere Abstände in eine Antikorrelation über. Bemerkenswert ist, daß auch die Chiralität der höheren Moden noch mit der trunkierten Dichte korreliert ist, wenn auch deutlich schwächer und mit geringerer Korrelationslänge. Dies deutet eine starke Kohärenz der Moden an.

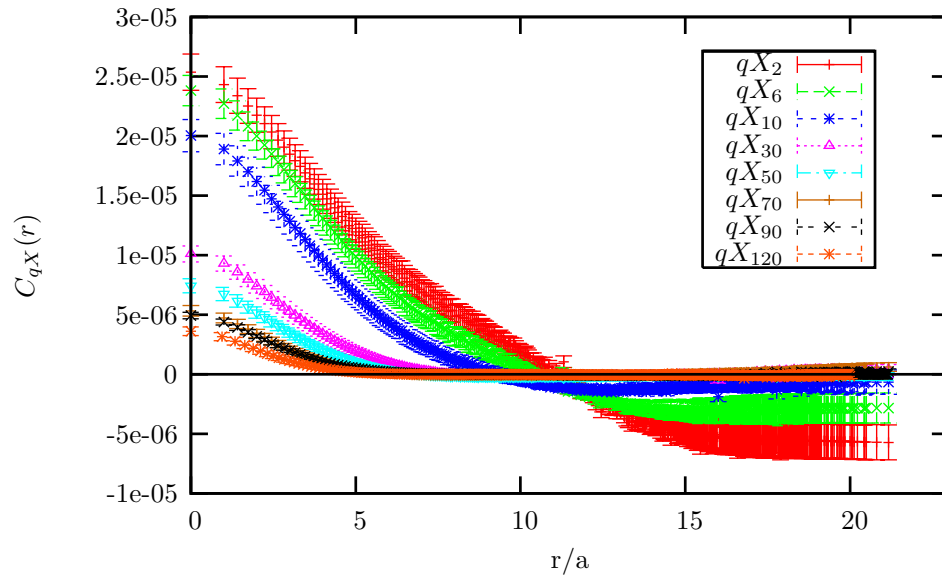


Abbildung 7.18: Die Korrelationsfunktion $C_{qX}(r)$ der trunkierten Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ mit Cutoff $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV und der lokalen Chiralität X_i der i -ten Nichtnullmode. Die Funktion wurde über alle Konfigurationen des $16^3 \times 32$ -Gitters bei $\beta = 8.45$ mit $Q = 0$ gemittelt.

Kapitel 8

Der gefilterte gluonische Feldstärketensor

8.1 Darstellung des Feldstärketensors

Die Analyse der topologischen Dichte hat gezeigt, daß die Trunkierung der spektralen Entwicklung der vollen Dichte als UV-Filter agiert und Fluktuationen auf der Skala des Gitter-Cutoffs eliminiert. Mit diesem Verfahren konnten Strukturen entdeckt werden, die eher im Einklang mit semiklassischen Modellen des Vakuums sind. Die gleiche Methode soll im Folgenden auf eine in einem Papier von Gattringer [25] vorgeschlagene spektrale Entwicklung des gluonischen Feldstärketensors angewendet werden. Damit ist es möglich, ein Maß der lokalen Selbstdualität der zugrunde liegenden Eichfelder zu definieren und die Dualitätseigenschaften des Feldstärketensors zu testen. Diese sind in allen semiklassischen Modellen von herausragender Bedeutung.

Die Repräsentation des Feldstärketensors durch die Moden des Overlap-Operators entspricht dem Ansatz neuerer Arbeiten von Horváth *et al.* [184, 185]. Hier wird eine Formulierung der Gitter-QCD vorgeschlagen, in der alle Elemente der Theorie, wie die Eichfeld- und Fermionwirkung, ein eventueller θ -Term oder etwa auch die topologische Ladungsdichte oder der Feldstärketensor ausgehend von einem einzigen Objekt konstruiert werden – dem diskretisierten Dirac-Operator.

Im Folgenden sei kurz die in [25] gegebene spektrale Darstellung des gluonischen Feldstärketensors (in unseren Konventionen (1.7) und (1.9)) für den Kontinuums-Dirac-Operator $\mathcal{D} = \sum_{\mu} \gamma_{\mu} D_{\mu}$ mit $\mathcal{D}|\psi_i\rangle = \lambda_i|\psi_i\rangle$ diskutiert.

Ausgehend von folgender Darstellung des Quadrats des Dirac-Operators

$$\mathcal{D}^2(x) = \sum_{\mu} D_{\mu}^2(x) + ig \sum_{\mu < \nu} \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} F_{\mu\nu}(x) \quad (8.1)$$

kann der gluonische Feldstärketensor $F_{\mu\nu}$ durch Multiplikation von \mathcal{D}^2 mit $\gamma_{\mu} \gamma_{\nu}$ und anschließender Spurbildung über die Spinor-Indizes S herausprojiziert werden¹

$$F_{\mu\nu}(x) = \frac{i}{4g} \text{Tr}_S \left[\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} \mathcal{D}^2(x) \right]. \quad (8.2)$$

Einzelne Colour-Komponenten können durch Multiplikation mit dem entsprechenden $SU(3)_c$ -Generator T^a in der fundamentalen Darstellung und anschließender Spurbildung über die Colour-Indizes C via

$$F_{\mu\nu}^a(x) = 2 \text{Tr}_C F_{\mu\nu}(x) T^a \quad (8.3)$$

$$= \frac{i}{2g} \text{Tr}_{CS} T^a \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} \mathcal{D}^2(x) \quad (8.4)$$

extrahiert werden.

Verwendet man hierin die Spektraldarstellung des quadrierten Dirac-Operators

$$\mathcal{D}^2(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 |\psi_i(x)\rangle \langle \psi_i(x)|, \quad (8.5)$$

so folgt für die einzelnen Komponenten des Feldstärketensors

$$F_{\mu\nu}^a(x) = \frac{i}{2g} \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 \text{Tr}_{CS} T^a \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} |\psi_i(x)\rangle \langle \psi_i(x)| \quad (8.6)$$

$$= \frac{i}{2g} \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 \langle \psi_i(x) | T^a \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} | \psi_i(x) \rangle \quad (8.7)$$

$$\equiv \frac{i}{2g} \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 f_{\mu\nu}^a(x)_i. \quad (8.8)$$

¹Für Overlap-Fermionen gilt diese Beziehung nur approximativ, beschreibt jedoch die wesentlichen Beiträge zu dem Feldstärketensor [25].

Damit lassen sich nun auch spektrale Entwicklungen der Wirkungsichte und der topologischen Dichte konstruieren.

Für die Wirkungsichte gilt

$$s_{\text{IR}}(x) \propto \text{Tr}_{\text{CS}} F(x)F(x) \quad (8.9)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu,a} (F_{\mu\nu}^a(x))^2 \quad (8.10)$$

$$= \frac{1}{8g^2} \sum_{\mu,\nu,a} \sum_{i,j=1}^N \lambda_i^2 \lambda_j^2 f_{\mu\nu}^a(x)_i f_{\mu\nu}^a(x)_j \quad (8.11)$$

und analog für die topologische Dichte

$$\begin{aligned} q_{\text{IR}}(x) &\propto \text{Tr}_{\text{CS}} F(x)\tilde{F}(x) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu,a} F_{\mu\nu}^a(x)\tilde{F}_{\mu\nu}^a(x) \\ &= \frac{1}{8g^2} \sum_{\mu,\nu,a} \sum_{i,j=1}^N \lambda_i^2 \lambda_j^2 f_{\mu\nu}^a(x)_i \tilde{f}_{\mu\nu}^a(x)_j \end{aligned} \quad (8.12)$$

mit den dualen Größen

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{\mu\nu}(x) &= \sum_{\rho,\sigma} \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}(x) \\ \tilde{f}_{\mu\nu}^a(x)_i &= \sum_{\rho,\sigma} \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} f_{\rho\sigma}^a(x)_i . \end{aligned} \quad (8.13)$$

8.2 Die lokale Selbstdualität der Eichfelder

Um die Selbstdualität² der gluonischen Felder zu charakterisieren, ist es aufschlußreich, analog zu Gleichung (6.1) folgendes Verhältnis zu betrachten

$$r(x) = \frac{s_{\text{IR}}(x) - q_{\text{IR}}(x)}{s_{\text{IR}}(x) + q_{\text{IR}}(x)} = \begin{cases} 0 & \text{für selbstduale Felder} \\ \infty & \text{für antiselbstduale Felder} . \end{cases} \quad (8.14)$$

Analog zu der von Horváth *et al.* eingeführten lokalen Chiralität $X(x)$ (6.2) kann auch dieses Verhältnis via

$$R(x) = \frac{4}{\pi} \arctan \left(\sqrt{r(x)} \right) - 1 = \begin{cases} -1 & \text{für selbstduale Felder} \\ +1 & \text{für antiselbstduale Felder} \end{cases} \quad (8.15)$$

²Sofern nicht explizit eine Unterscheidung zwischen selbstdualen und antiselbstdualen Feldern nötig ist, verwenden wir den Begriff der Selbstdualität als Oberbegriff.

auf das Intervall $[-1, +1]$ abgebildet werden.

Trunkiert man die spektrale Entwicklung des Feldstärketensors und der Ladungs- bzw. Wirkungsdichte, so erhält man analog zu der im letzten Abschnitt betrachteten trunkierten topologischen Ladungsdichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ UV-gefilterte Versionen dieser Größen. Der Vorteil in der Betrachtung des Verhältnisses (8.14) liegt darin, daß sich hierbei der a priori unbekannte Normierungsfaktor der trunkierten Dichten herauskürzt. Für rein (anti-)selbstduale Felder ist die Verteilungsfunktion von $R(x)$ eine δ -Funktion bei ± 1 . Für Konfigurationen, die durch (anti-)selbstduale Felder dominiert werden, erwartet man, daß die Verteilung eine ähnliche Doppel-Peak-Struktur wie die der lokalen Chiralität aufweist.

In Abbildung 8.1 zeigen wir normierte Histogramme der Variable $R(x)$ in Abhängigkeit von der in der spektralen Entwicklung des Feldstärketensors enthaltenen Eigenmoden N . Die Daten sind hierbei über das aus 37 Konfigurationen bestehende Unterensemble der $16^3 \times 32$ -Konfigurationen bei $\beta = 8.45$ mit verschwindender Ladung gemittelt. Abbildung 8.1 (a) zeigt die Abhängigkeit der Verteilung der Selbstdualität $R(x)$ von der Anzahl der in der Entwicklung des Feldstärketensors verwendeten Moden. Bei der Berechnung der Histogramme werden hierbei alle Gitterpunkte berücksichtigt. Bei $N = 2$ zeigt die Verteilung zwei markante Spitzen bei ± 1 , die bei der Hinzunahme von mehr Moden abgeschwächt werden, allerdings selbst bei $N = 20$ Moden in der Entwicklung noch schwach sichtbar sind. Das Signal kann verstärkt werden, indem man nur einen bestimmten Anteil der Gitterpunkte mit maximaler Wirkungsdichte $s_{\text{IR}}(x)$ betrachtet, wie in Abbildung 8.1 (b) für den Fall von $N = 20$ Moden in der Entwicklung gezeigt wird. Die Peaks der Wirkungsdichte sind somit die Anregungen des Vakuums mit stärkster Selbstdualität.

Die Histogramme von $R(x)$ geben noch keinerlei Auskunft darüber, ob die Gitterpunkte mit hoher Selbstdualität vollkommen zufällig über das Gitter verteilt sind oder in zusammenhängenden Gebieten auftreten. Um einen ersten visuellen Eindruck der Verteilung der Gebiete hoher Selbstdualität zu vermitteln, werden in Abbildung 8.2 für eine Zeitschicht einer typischen Konfiguration auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ Isoflächen von $|R(x)| = R_{\text{cut}} \lesssim 1$ gezeigt. Die Farbgebung kodiert hierbei das Vorzeichen von $R(x)$. Man sieht, daß die Gebiete starker Selbstdualität in den Gebieten weniger starker Selbstdualität enthalten sind. Die Isoflächen kennzeichnen damit Gebiete, die in ihrem Inneren ein hohes Maß an Selbstdualität aufweisen. Die Ähnlichkeit dieser Plots mit den in Abbildung 7.5 gezeigten Isoflächen der

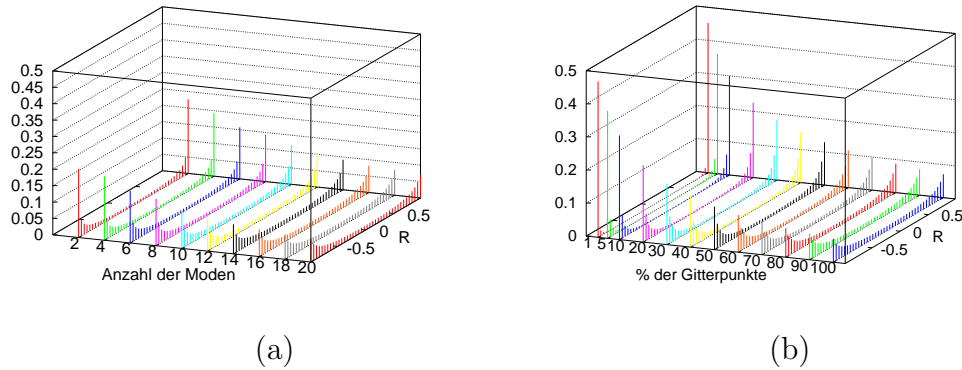


Abbildung 8.1: Normierte Histogramme der lokalen Selbstdualität des gluonischen Feldstärketensors auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$, gemittelt über 37 Konfigurationen mit $Q = 0$. Das linke Bild (a) zeigt die Histogramme in Abhängigkeit von der in der spektralen Entwicklung des Feldstärketensors verwendeten Anzahl von Nichtnullmoden unter Berücksichtigung aller Gitterpunkte. Das rechte Bild (b) zeigt für eine feste Anzahl von 20 Moden Histogramme in Abhängigkeit des prozentualen Anteils der berücksichtigten Gitterpunkte mit größter Wirkungsdichte.

UV-gefilterten topologischen Ladungsdichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}$ motiviert zu einer direkten Gegenüberstellung. In Abbildung 8.3 wird daher exemplarisch ein Vergleich zwischen den Isoflächen von $R(x)$ basierend auf 10 Moden (linke Spalte) und der trunkierten Ladungsdichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}$ mit kleinstem λ -Cutoff $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV (18 Nichtnullmoden) gezeigt. In der oberen Bildreihe sieht man, daß die Gebiete nahezu exakter Selbstdualität $R_{\text{cut}} = 0.999$ (a) erstaunlich gut mit den Gebieten der UV-gefilterten Ladungsdichte mit $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.2$ im nichtperkolierenden Bereich (b) übereinstimmen. Weniger stark selbstduale Flächen (c) korrespondieren mit Flächen mit $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ -Werten im perkolierenden Bereich (d).

Eine andere Visualisierung des Zusammenhangs der Bereiche hoher Selbstdualität und der über den Feldstärketensor definierten topologischen Ladungsdichte $q_{\text{IR}}(x)$ basierend auf 10 Nichtnullmoden sowie der trunkierten topologischen Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ mit $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV zeigt Abbildung 8.4 anhand von Profilen in der x - y -Ebene. Der positive bzw. negative Peak der gefilterten Dichten (a) und (b) stimmt gut mit den Bereichen hoher Selbstdualität (d) bzw. Antiselbstdualität (e) $|R(x)| > 0.95$ überein. Die volle Dichte (c) hingegen ist mit diesen infraroten Strukturen nicht korreliert.

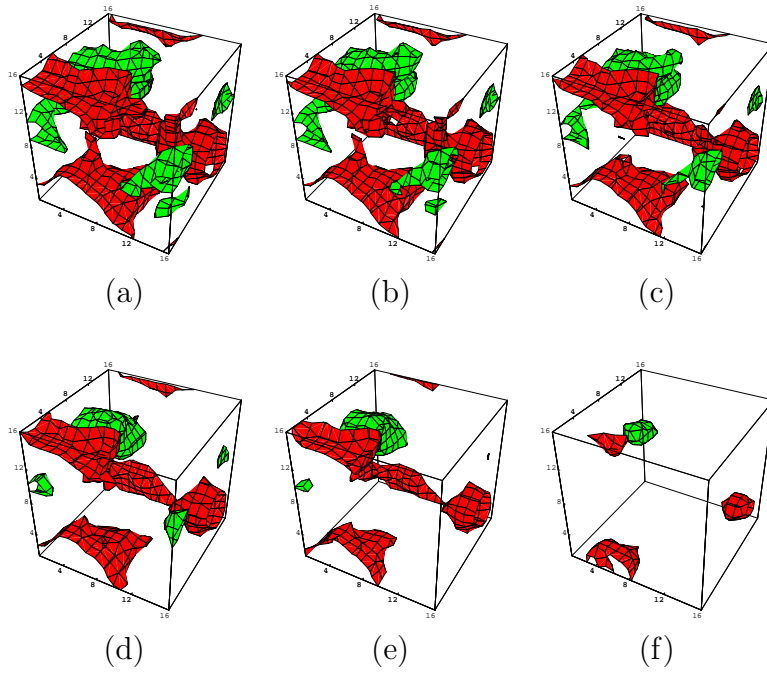


Abbildung 8.2: Isoflächen der lokalen Selbstdualität $R(x)$ für eine typische Konfiguration auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ auf einer einzelnen ausgewählten Zeitschicht basierend auf 10 Moden. Die Farbgebung kodiert hierbei das Vorzeichen von $R(x)$. Die sechs Bilder sind nach ansteigendem Grad an Selbstdualität der Flächen sortiert: (a) $R_{\text{cut}} = 0.95$, (b) $R_{\text{cut}} = 0.96$, (c) $R_{\text{cut}} = 0.97$, (d) $R_{\text{cut}} = 0.98$, (e) $R_{\text{cut}} = 0.99$, (f) $R_{\text{cut}} = 0.999$.

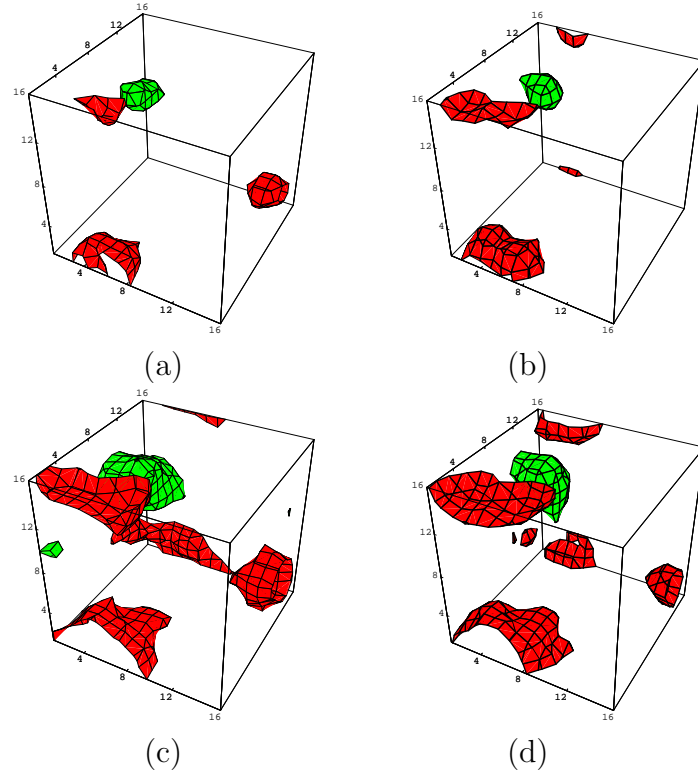


Abbildung 8.3: Direkte Gegenüberstellung der Isoflächen der lokalen Selbstdualität $R(x)$ basierend auf 10 Moden (linke Spalte) und der trunkierten Ladungsdichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}$ mit kleinstem λ -Cutoff $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV (18 Nichtnullmoden) für folgende Cutoff-Werte: (a) $R_{\text{cut}} = 0.999$ (b) $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.2$ (c) $R_{\text{cut}} = 0.99$ (d) $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$. Annähernd selbstduale (antiselbstduale) Gebiete und Regionen mit positiver (negativer) Ladungsdichte werden rot (grün) gezeigt.

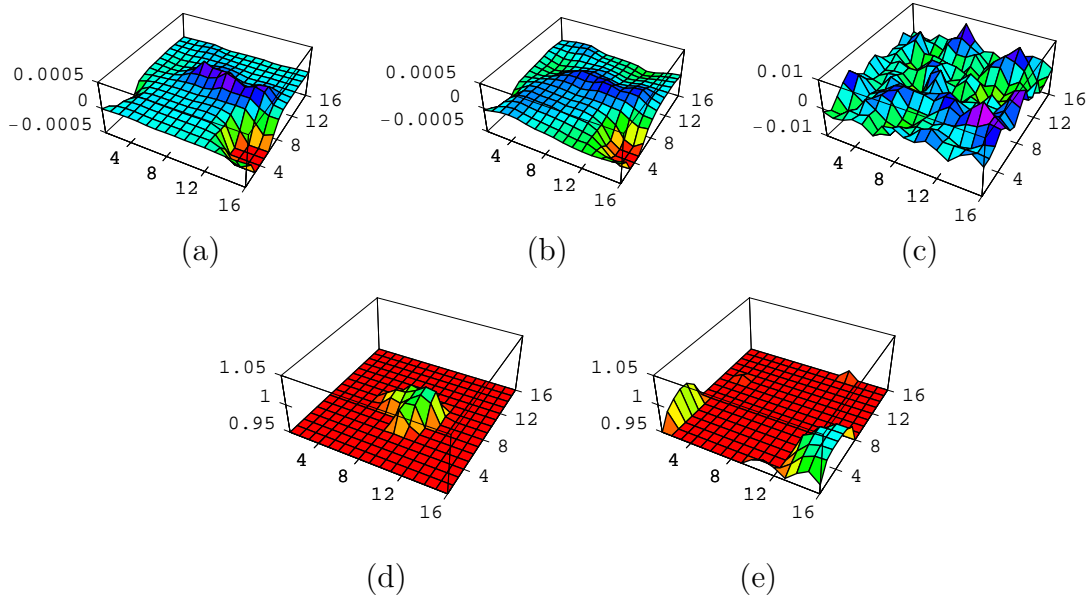


Abbildung 8.4: Direkte Gegenüberstellung von Profilen folgender Größen in der x - y -Ebene mit festem z und t für eine typische $16^3 \times 32$ -Konfiguration bei $\beta = 8.45$ mit $Q = 0$: (a) Die über den Feldstärketensor definierte topologische Ladung $q_{\text{IR}}(x)$ basierend auf 10 Nichtnullmoden, (b) die trunkierte topologische Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ mit $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV und (c) die volle topologische Dichte. Die vertikale Skala der Abb. (a) wurde hierbei frei der Skala von (b) angeglichen. Die unteren Abbildungen zeigen den negativen (d) und positiven (e) Teil der lokalen Selbstdualität $R(x)$.

8.3 Clusteranalyse der Bereiche hoher Selbstdualität

Um eine quantitativere Beschreibung der Bereiche hoher Selbstdualität zu ermöglichen, wurde auch hier eine Clusteranalyse vorgenommen. Untersucht werden Link-verbundene Vorzeichen-kohärente Bereiche hoher Selbstdualität mit $|R(x)| \geq R_{\text{cut}}$ in Abhängigkeit des Cutoffs $0.94 \leq R_{\text{cut}} \leq 1$. Je kleiner R_{cut} ist, desto größer sind die tolerierten Abweichungen von exakter Selbstdualität. Die Ergebnisse der Clusteranalyse werden in Abbildung 8.5 gezeigt, wobei die Daten, sofern nicht anders angegeben, über alle Konfigurationen mit $Q = 0$ auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ gemittelt wurden. Um die Abhängigkeit der Clustereigenschaften von der Anzahl der in der Entwicklung des Feldstärketensors eingehenden Moden aufzuzeigen, werden alle Ergebnisse sowohl für 10 als auch für 20 Moden diskutiert.

- **Clusterperkolation** (Abb. 8.5 (a))

Die Perkolation des größten Clusters beginnt unabhängig von der Anzahl der Moden bei $R_{\text{cut}} = 0.995$. Die Perkolations-Wahrscheinlichkeit ist für weniger Moden größer, ist jedoch insgesamt klein. (Man beachte die im Vergleich zu Abbildung 7.10 um einen Faktor 22 kleinere Skala.)

- **Anzahl der Cluster** (Abb. 8.5 (b))

Im Limes $R_{\text{cut}} \rightarrow 1$ ist die Anzahl der Cluster nur geringfügig von der Anzahl der Moden abhängig. Die ersten auftauchenden Cluster mit nahezu exakter Selbstdualität werden also für 10 bzw. 20 Moden gleich gut erkannt. Für kleinere R_{cut} ist das Verhältnis (Anzahl der Cluster)/(Anzahl der Moden) in Abhängigkeit von der Anzahl der Moden nahezu konstant. Mit abnehmendem R_{cut} nimmt auch die Anzahl der Cluster ab. Dies bedeutet, daß mit größerer Toleranz gegenüber Abweichungen von exakter Selbstdualität die Cluster zusammenwachsen, jedoch keine neuen isolierten Cluster hinzukommen. Die maximale Anzahl der R -Cluster bei der Verwendung von 10 Moden ist vergleichbar mit der maximalen Anzahl der $q_{\lambda_{\text{cut}}}$ -Cluster der trunkierten topologischen Dichte mit $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV (≈ 13 Moden) in Abbildung 7.10 (b2).

- **Abstand der beiden größten Cluster $d(C^{\text{max1}}, C^{\text{max2}})$ in Gittereinheiten** (Abb. 8.5 (c))

Für hohe R_{cut} sind die beiden größten nahezu exakt (anti-)selbstdualen Cluster 12 Gittereinheiten entfernt. Die Bereiche hoher Selbstdualität

sind also deutlich voneinander separiert. Auch beim Übergang in den perkolierenden Bereich sinkt der Abstand nicht unter 6 Gittereinheiten.

- **Mittleres Volumen der Cluster und fraktionales Volumen der beiden größten Cluster $C^{\max 1}$ und $C^{\max 2}$** (Abb. 8.5 (d),(e),(f))

Das fraktionale Volumen der beiden größten Cluster ist deutlich größer als das mittlere Clustervolumen. Im Übergang zu kleineren R_{cut} wachsen die beiden dominierenden Cluster systematisch an. Die Bereiche sehr starker Selbstdualität sind in den Clustern mit toleranterem R_{cut} enthalten. Dies wurde bereits in der Isoflächen-Darstellung 8.2 deutlich. Für kleinere R_{cut} ist das Produkt (Volumen des Clusters)·(Anzahl der Moden) in Abhängigkeit von der Anzahl der Moden nahezu konstant. Für hohe $R_{\text{cut}} \lesssim 1$ ist das fraktionale Volumen der beiden größten Cluster für 10 Moden jedoch deutlich größer. Die Kohärenz weniger Moden läßt die selbstdualen Gebiete größer erscheinen.

- **Fraktionales Clustervolumen aller Cluster** (Abb. 8.6)

Die gesamte Packungsdichte wird für kleiner R_{cut} im perkolierenden Bereich nahezu komplett durch die beiden größten Cluster bestimmt. Eines dieser Cluster ist stets etwas größer. Für den Bereich des Maximums der Anzahl der Cluster existieren weitere Cluster mit fraktionalem Clustervolumen von ca. 10%. Für die schon oft verwendete Beispielkonfiguration ist dies in Abbildung 8.6 exemplarisch gezeigt. Die untere Bildreihe zeigt zusätzlich die in den R -Clustern enthaltene volle topologische Ladungsdichte $q(x)$. Für $R_{\text{cut}} = 0.99$ gibt es ca. 20 signifikante Cluster, wobei die beiden größten R -Cluster eine topologische Ladung von $q(C^{\max 1}) = -3$ bzw. $q(C^{\max 2}) = 1$ tragen. Tief im perkolierenden Bereich mit $R_{\text{cut}} = 0.96$ existieren lediglich zwei dominante Cluster, die das Clustergesamtvolumen im Verhältnis von etwa 55/45 ausfüllen. Die große topologische Ladung der Cluster hebt sich gegenseitig auf. Das Anwachsen der topologischen Ladung der beiden größten annähernd selbstdualen Cluster bei Erniedrigung von R_{cut} läßt sich in Instanton-Modellen nicht erklären. In semiklassischen Modellen geht man stets von (anti-)selbstdualen Objekten mit Ladung $Q = \pm 1$ aus, die unkorreliert sind bzw. sich in einem Paar von Instanton und Antiinstanton zusammenschließen, jedoch nicht von anwachsenden Gebieten mit zunehmender Ladung $|Q| \gg 1$.

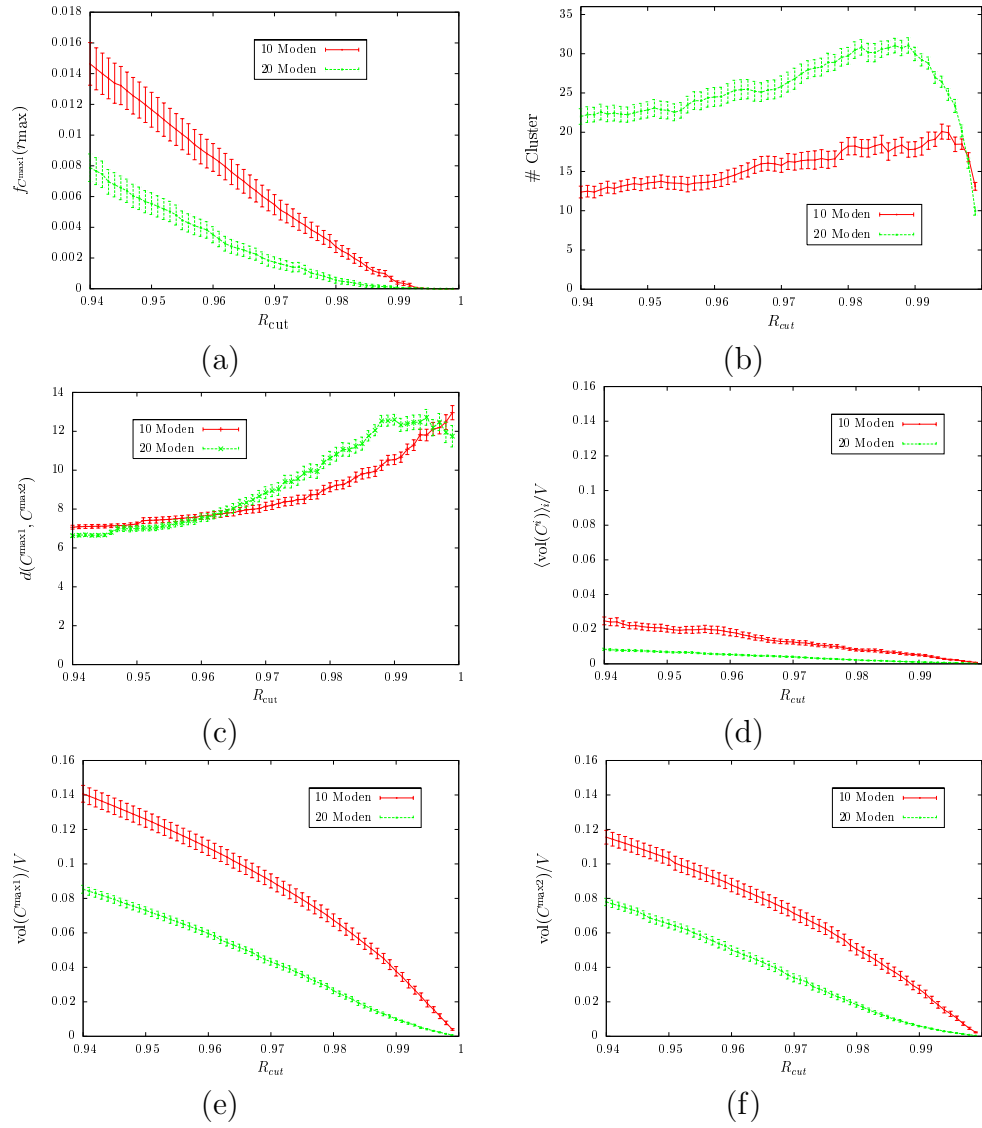


Abbildung 8.5: Ergebnisse der Clusteranalyse der lokalen Selbstdualität $R(x)$ für das $Q = 0$ Unterensemble auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ (I). Gezeigt wird die R_{cut} -Abhängigkeit für folgende gemittelte Größen: (a) Clusterperkolations, (b) die Anzahl der Cluster, (c) der Abstand der beiden größten Cluster in Gittereinheiten, (d) das mittlere Volumen der Cluster, sowie das fraktionale Clustervolumen des größten (e) bzw. des zweitgrößten (f).

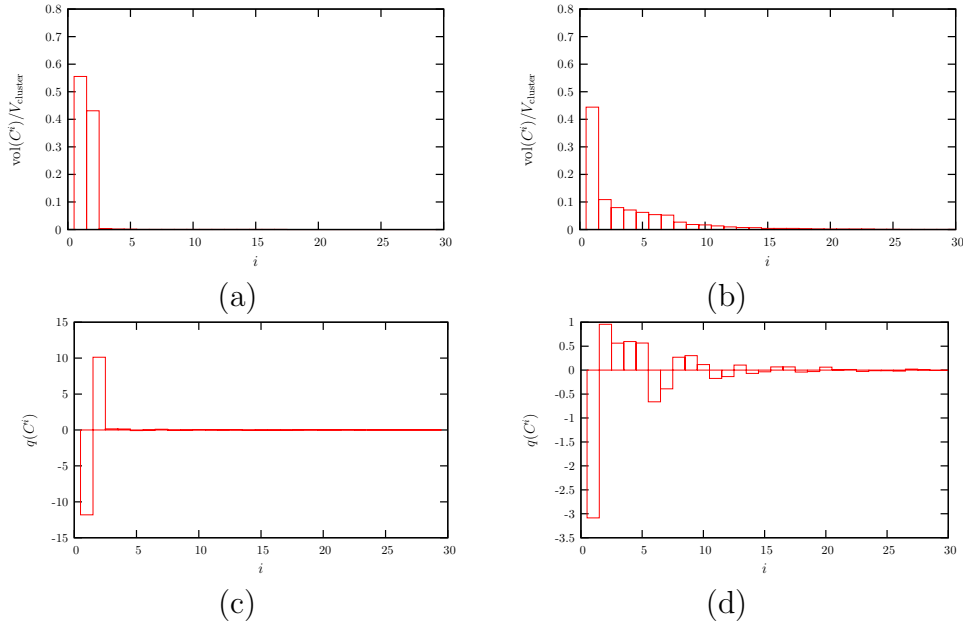


Abbildung 8.6: Ergebnisse der Clusteranalyse der lokalen Selbstdualität $R(x)$ für eine typische Konfiguration auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$. Gezeigt wird in der oberen Bildreihe das fraktionale Clustervolumen der Cluster und in der unteren Reihe deren Ladung basierend auf der vollen topologischen Dichte $q(x)$ für zwei verschiedene Cutoffs $R_{\text{cut}} = 0.96$ (linke Spalte) und $R_{\text{cut}} = 0.99$ (rechte Spalte).

Kapitel 9

Saturierung hadronischer Korrelationsfunktionen

9.1 Grundlagen

In Abschnitt 5.3 haben wir gesehen, daß die skalare Dichte bei niedrigem Cutoff $p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$ perkolierende Cluster formiert. Dies ist eine notwendige Voraussetzung, daß die Propagation leichter Hadronen möglich ist. Im Folgenden soll die Saturierung der Korrelationsfunktion des pseudoskalaren Mesons (Pions) und des Vektormesons (ρ -Meson) näher betrachtet werden.

Die interpolierenden Felder der Mesonen lassen sich im Impulsraum allgemein durch Operatoren der Form

$$\mathcal{O}_{\Gamma}^F(t, \underline{p}) = \sum_{\substack{x \\ x_4=t}} \sum_{\substack{a,b \\ \alpha,\beta \\ i}} e^{-i\underline{p}\underline{x}} F_{ab} \bar{\Psi}_{a\alpha}^i(x) \Gamma_{\alpha\beta} \Psi_{b\beta}^i(x) \quad (9.1)$$

beschreiben. $F_{ab} \in \text{SU}(N_f)$ ist hierbei eine Flavour-Matrix, die für Oktett-Mesonen spurlos, für Singulett-Teilchen jedoch diagonal ist. Durch die Fourier-Transformation werden Zustände mit festem Impuls \underline{p} herausprojiziert. Wir verwenden folgende Index-Konvention $\Psi_{a\alpha}^i(x) = \Psi_{\text{Flavour Dirac}}^{\text{Colour}}(x)$. Die Matrix $\Gamma_{\alpha\beta}$ im Spinorraum ist durch die Quantenzahlen J^{PC} des betrachteten Mesons wie in Tabelle 9.1 angegeben festgelegt.

Meson	J^{PC}	$\bar{\Psi}(x)\Gamma\Psi(x)$
skalares Meson	0^{++}	$\bar{\Psi}(x)\mathbb{1}\Psi(x)$
	0^{+-}	$\bar{\Psi}(x)\gamma_4\Psi(x)$
pseudoskalares Meson	0^{-+}	$\bar{\Psi}(x)\gamma_5\Psi(x)$
	0^{-+-}	$\bar{\Psi}(x)\gamma_4\gamma_5\Psi(x)$
Vektormeson	1^{-+}	$\bar{\Psi}(x)\gamma_i\Psi(x)$
	1^{-+-}	$\bar{\Psi}(x)\gamma_i\gamma_4\Psi(x)$
Axialvektormeson	1^{++}	$\bar{\Psi}(x)\gamma_i\gamma_5\Psi(x)$
Tensormeson	1^{+-}	$\bar{\Psi}(x)\gamma_i\gamma_j\Psi(x)$

 Tabelle 9.1: Interpolierende Felder der Mesonen mit Quantenzahlen J^{PC} .

Die mesonischen Korrelationsfunktionen berechnen sich wie folgt:

$$\begin{aligned}
 C_{\Gamma\Gamma'}^{FF'}(t, \underline{p}) &= \sum_{\substack{x_4, y_4 \\ |x_4 - y_4| = t}} \left\langle \mathcal{O}_{\Gamma}^F(x_4, \underline{p}) \mathcal{O}_{\Gamma'}^{F'}(y_4, -\underline{p}) \right\rangle \\
 &= \left\langle \left(\sum_{\substack{x \\ |x_4 - y_4| = t}} \sum_{\substack{a, b \\ \alpha, \beta \\ i}} e^{-i\underline{p}\underline{x}} F_{ab} \bar{\Psi}_{a\alpha}^i(x) \Gamma_{\alpha\beta} \Psi_{b\beta}^i(x) \right) \right. \\
 &\quad \left. \left(\sum_y \sum_{\substack{a', b' \\ \alpha', \beta' \\ j}} e^{-i(-\underline{p})\underline{y}} F'_{a'b'} \bar{\Psi}_{a'\alpha'}^j(y) \Gamma'_{\alpha'\beta'} \Psi_{b'\beta'}^j(y) \right) \right\rangle \\
 &= \sum_{\substack{x, y \\ |x_4 - y_4| = t}} e^{-i\underline{p}(\underline{x} - \underline{y})} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha', \beta' \\ i, j}} F_{ab} F'_{a'b'} \Gamma_{\alpha\beta} \Gamma'_{\alpha'\beta'} \left\langle \bar{\Psi}_{a\alpha}^i(x) \Psi_{b\beta}^i(x) \bar{\Psi}_{a'\alpha'}^j(y) \Psi_{b'\beta'}^j(y) \right\rangle \\
 &\stackrel{(i)}{=} \sum_{\substack{x, y \\ |x_4 - y_4| = t}} e^{-i\underline{p}(\underline{x} - \underline{y})} \left(- \sum_{a, b} F_{ab} F'_{a'b'} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha', \beta' \\ i, j}} \Gamma_{\alpha\beta} G_{\beta\alpha'}^{ij}(x, y) \Gamma'_{\alpha'\beta'} G_{\beta'\alpha}^{ji}(y, x) + \right. \\
 &\quad \left. \sum_a F_{aa} \sum_{a'} F'_{a'a'} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha', \beta' \\ i, j}} \Gamma_{\alpha\beta} G_{\beta\alpha}^{ii}(x, x) \sum_{\substack{\alpha', \beta' \\ j}} \Gamma'_{\alpha'\beta'} G_{\beta'\alpha'}^{jj}(y, y) \right) \\
 &\stackrel{(ii)}{=} \sum_{\substack{x, y \\ |x_4 - y_4| = t}} e^{-i\underline{p}(\underline{x} - \underline{y})} \left(-\text{Tr}(FF') \text{Tr}_{\text{CS}}(\gamma_5 \Gamma G(x, y) \Gamma' \gamma_5 G(x, y)^\dagger) + \right. \\
 &\quad \left. \text{Tr}(F) \text{Tr}(F') \text{Tr}_{\text{CS}}(\Gamma G(x, x)) \text{Tr}_{\text{CS}}(\Gamma' G(y, y)) \right). \tag{9.2}
 \end{aligned}$$

Bei der Rechnung wurden in (i) zur Berechnung des Erwartungswertes des Produkts der bilinear auftretenden Quarkfelder alle möglichen vollständigen Wick-Kontraktionen gebildet und diese durch Quarkpropagatoren

$$\overline{\Psi_{a\alpha}^i(x)\bar{\Psi}_{b\beta}^j(y)} = \delta_{ab}G_{\alpha\beta}^{ij}(x,y) \quad (9.3)$$

ersetzt. In (ii) wurde die γ_5 -Hermitizität des Quarkpropagators

$$G(y,x) = \gamma_5 G(x,y)^\dagger \gamma_5 \quad (9.4)$$

ausgenutzt.

Der erste Term in (9.2) wird als verbundener Term (auch „Flavour-Nichtsingulett“), der zweite entsprechend als nichtverbundener Term (auch „Flavour-Singulett“) bezeichnet. Für Flavour-Oktett-Teilchen ist die Spur der Flavour-Matrix F gleich Null, so daß der nichtverbundene Term verschwindet.

Wir betrachten im Rahmen dieser Arbeit nur Flavour-Nichtsingulett-Teilchen, so daß die zu berechnenden Korrelationsfunktionen sich auf

$$C_{\Gamma\Gamma'}^{FF'}(t,\underline{p}) = - \sum_{\substack{x,y \\ |x_4-y_4|=t}} e^{-i\underline{p}(\underline{x}-\underline{y})} \text{Tr}(FF') \text{Tr}_{\text{CS}}(\gamma_5 \Gamma G(x,y) \Gamma' \gamma_5 G(x,y)^\dagger) \quad (9.5)$$

reduzieren.

Zur Berechnung der Propagatoren muß das folgende Gleichungssystem gelöst werden

$$\sum_y D(x,y)G(y,x_0) = S(x,x_0) . \quad (9.6)$$

Der Vektor $S(x,x_0)$ wird als Quelle bezeichnet. Im einfachsten Fall beschränkt man sich auf eine feste Punktquelle $S_p(x,x_0) = \delta(x,x_0)$. Physikalisch ist jedoch zu erwarten, daß eine Quelle mit einer dem zu untersuchenden Meson entsprechenden Ausdehnung ein besseres Signal liefert. Es gibt verschiedene Verfahren, um die Punktquelle S_p in der Zeitschicht zu einer ausgedehnten Quelle zu „verschmieren“. Bei der als „Jacobi-Smearing“ [186] bezeichneten Methode wird die Punktquelle durch Multiplikation mit der Matrix

$$\begin{aligned} J(\underline{x},\underline{y},t) &= \delta(\underline{x},\underline{y}) + \kappa_S \mathcal{D}(\underline{x},\underline{y},t) + \kappa_S^2 \sum_{\underline{z}} \mathcal{D}(\underline{x},\underline{z},t) \mathcal{D}(\underline{z},\underline{y},t) \\ &+ \dots + \sum_{\underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{N_S-1}} \mathcal{D}(\underline{x},\underline{z}_1,t) \mathcal{D}(\underline{z}_1,\underline{z}_2,t) \dots \mathcal{D}(\underline{z}_{N_S-1},\underline{y},t) \end{aligned} \quad (9.7)$$

modifiziert. Hierbei sind N_S bzw. κ_S geeignete Parameter und

$$\mathcal{D}(\underline{x}, \underline{y}, t) = \sum_{\mu=1}^3 (U_{\mu}(\underline{x}, t) \delta(\underline{x} + \hat{\mu}, \underline{y}) + U_{\mu}^{\dagger}(\underline{x} - \hat{\mu}, t) \delta(\underline{x} - \hat{\mu}, \underline{y})) \quad (9.8)$$

die kovariante Ableitung.

In [70] wurden von der QCDSF-Kollaboration unter der Verwendung von Jacobi-geschmierten Quellen durch Lösen des linearen Gleichungssystems (9.6) die wichtigsten Korrelationsfunktionen der leichtesten Hadronen berechnet. Diese durch Invertierung des Dirac-Operators gewonnenen Korrelationsfunktionen werden im Folgenden als „volle Korrelationsfunktionen“ bezeichnet.

Um zu sehen, wie gut die vollen Korrelationsfunktionen durch die niedrigsten Moden approximiert werden, verwenden wir in (9.5) die Spektraldarstellung des Propagators

$$G(x, y) = \sum_i \frac{1}{\lambda_i^{\text{imp}} + m_q} \frac{|\psi_i(x)\rangle \langle \psi_i(y)|}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}. \quad (9.9)$$

Das Schmieren der Quelle kann in der Spektraldarstellung erreicht werden, indem die Matrix (9.7) auf die Eigenvektoren des Dirac-Operators angewendet wird: $|\psi_i\rangle \rightarrow J|\psi_i\rangle$. Sowohl zur Berechnung der vollen Korrelationsfunktionen als auch der spektralen Entwicklung werden Jacobi-geschmierte Quellen mit $\kappa_S = 0.21$ und $N_S = 50$ verwendet. Die Senken werden nicht verschmiert.

9.2 Korrelationsfunktionen des Pions und des ρ -Mesons.

Für das Pion mit $\Gamma = \Gamma' = \gamma_5$ ergibt sich für den hier betrachteten Fall $\underline{p} = 0$ die folgende spektrale Darstellung der Korrelationsfunktion:

$$C(t) \propto \sum_{t'} \sum_{k,l} \frac{1}{(\lambda_k^{\text{imp}} + m_q)(\lambda_l^{\text{imp}} + m_q)} \frac{\langle \psi^l(t' + t) | \psi^k(t' + t) \rangle \langle \psi^k(t') | \psi^l(t') \rangle}{\langle \psi^k | \psi^k \rangle \langle \psi^l | \psi^l \rangle}.$$

Abbildung 9.1 (a) zeigt einen Vergleich des vollen Pionkorrelators mit unterschiedlich trunkierten Korrelatoren. Man erkennt, daß $\mathcal{O}(40)$ Moden ausreichen, um den vollen Korrelator für große Zeitabstände zwischen Quelle und Senke zu saturieren.

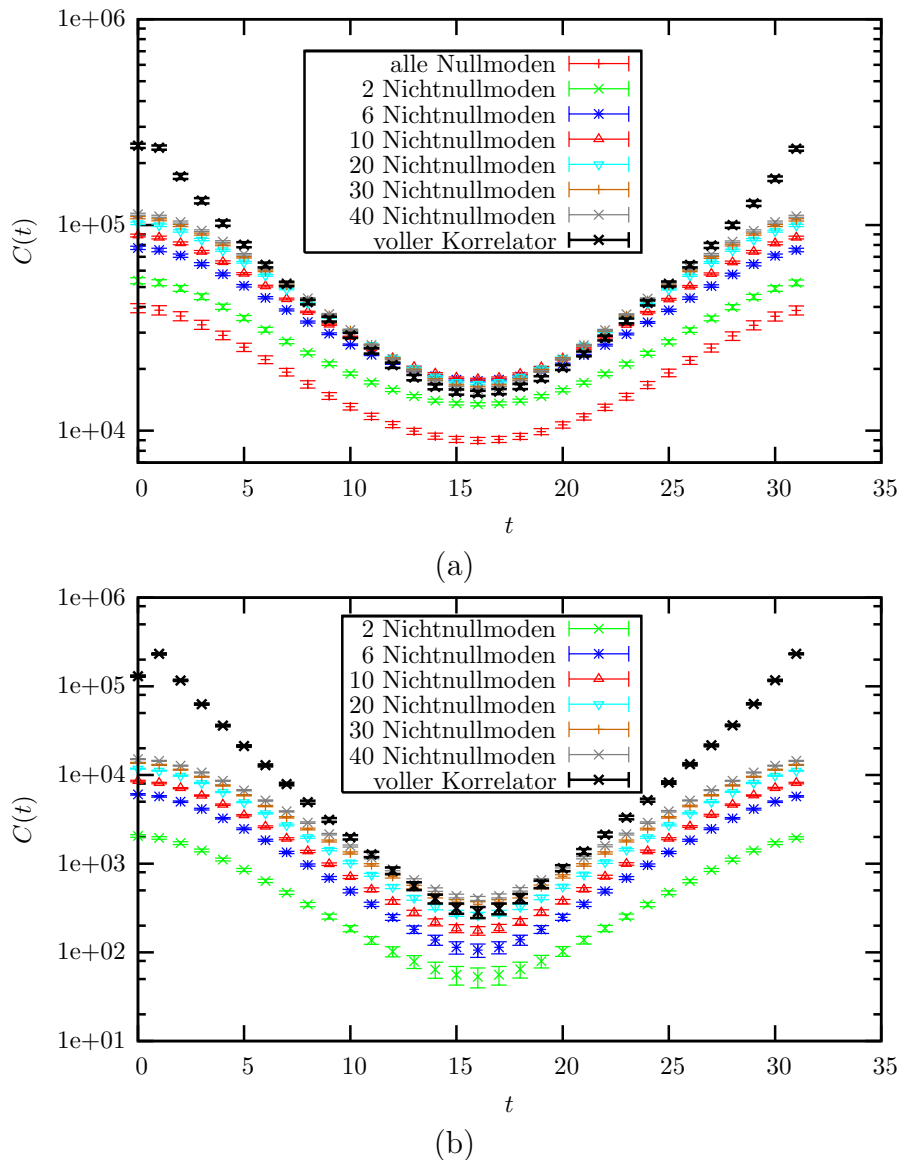
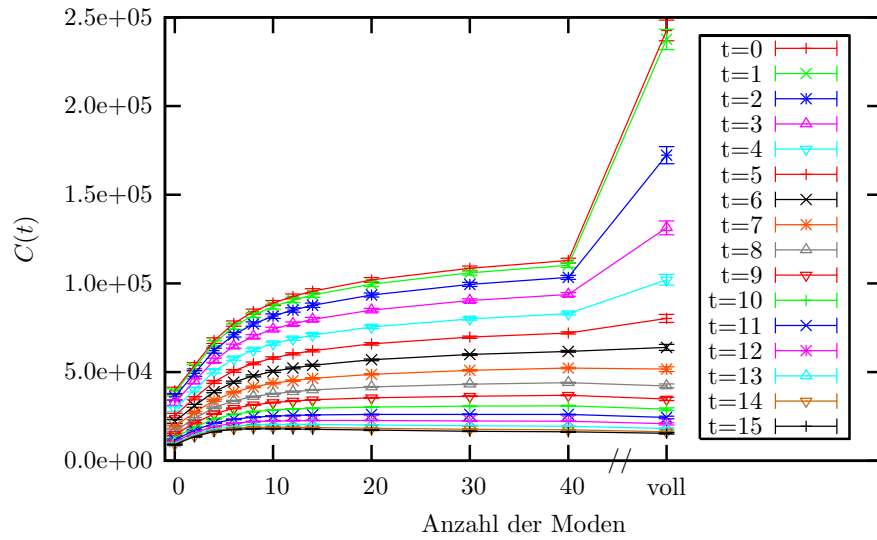
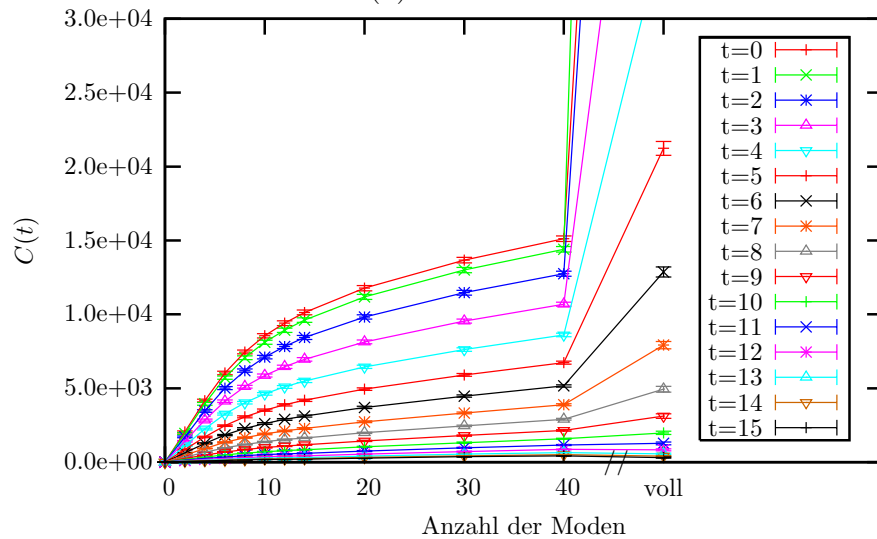


Abbildung 9.1: Vergleich des vollen Pion- (a) bzw. Vektormeson-Propagators (b) mit dem spektral entwickelten Propagator auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ für unterschiedliche Trunkierungen. Die Quarkmasse beträgt hierbei $am_q/2\rho = 0.01$ ($am_q = 0.028$). Der volle Propagator wurde durch Inversion des Overlap-Operators mit Jacobi-geschmierten Quellen ($\kappa_S = 0.21$ und $N_S = 50$) und Punktsenken berechnet. Für den spektral entwickelten Propagator wird der akkumulierte Beitrag der Nullmoden, sowie der kleinsten 2, 6, 10, 20, 30 und 40 Nichtnullmoden gezeigt. Im Fall des Vektormesons tragen die Nullmoden nicht zum Propagator bei. Gemittelt wurde stets über 250 Konfigurationen.



(a)



(b)

Abbildung 9.2: Abhängigkeit des Pion- (a) bzw. Vektormeson-Propagators von der Anzahl der in der spektralen Entwicklung verwendeten Nichtnullmoden für unterschiedliche Zeitschichten $t = 0, \dots, 15$. Der Wert bei Null ist der akkumulierte Beitrag der Nullmoden. Im Falle des Vektormesons tragen diese nicht zum Propagator bei. Der am rechten Ende der Graphen dargestellte Wert basiert auf dem vollen Propagator. Die Simulationsdaten sind identisch zu denen in Abbildung 9.1.

In Abbildung 9.2 (a) wird die Korrelationsfunktion des Pions in Abhängigkeit von der Anzahl der in der spektralen Entwicklung verwendeten Moden für unterschiedliche Zeitschichten $t = 0, \dots, 15$ gezeigt. Für $t \geq 6$ bilden sich bereits bei 20 Moden deutliche Plateaus, die Hinzunahme von mehr Moden in der Entwicklung verändert die Korrelationsfunktion kaum. Dies bestärkt die Vorstellung, daß die niedrig liegenden Moden die wesentliche physikalische Information tragen und das Propagations-Verhalten bei großen Zeitabständen zwischen Quelle und Senke gut beschreiben. Nur für kleine Zeiten sind die Abweichungen zwischen dem vollen Korrelator und den trunkierten Korrelatoren größer.

Die Saturierung des Vektormeson-Korrelators mit $\Gamma = \Gamma' = \gamma_i$ ist schlechter. Wir summieren zur Berechnung der Korrelationsfunktion alle drei Beiträge mit $i = 1, \dots, 3$. Wie Abbildung 9.2 (b) zeigt, bilden sich nur für große Zeitabstände $t > 10$ Plateaus, bei kleineren Zeiten sind die Abweichungen zwischen dem vollen Korrelator und den trunkierten Korrelatoren größer als beim Pionpropagator. Dies wurde auch in einer ähnlichen Analyse mit Overlap-Fermionen auf Eichfeldern, die mit der Wilson-Wirkung generiert wurden, beobachtet [187] und im Instanton-Modell erklärt: Die beiden Quarks des Vektormesons müssen an zwei unterschiedliche Instantonen koppeln, um chiral propagieren zu können. Dies erfordert eine Distanz in der Größenordnung des zweifachen Instanton-Radius. Für kleinere Abstände propagieren die Quarks wie freie Teilchen und sind nicht an die Moden des Dirac-Operators gekoppelt.

Im Gegensatz zum Pion tragen die Nullmoden im Fall des Vektormesons nicht zur Korrelationsfunktion bei, da für diese der in der Korrelationsfunktion des Vektormesons auftretende Term $\langle \psi(x) | \gamma_i \gamma_5 | \psi(x) \rangle$ verschwindet. Dies folgt allein aus der Struktur der Clifford-Algebra der γ -Matrizen und der exakten Chiralität der Nullmoden. Sei $\gamma_5 | \psi(x) \rangle = \chi | \psi(x) \rangle$ und $\langle \psi(x) | \gamma_5 = \chi \langle \psi(x) |$ mit $\chi = \pm 1$. Aus $\langle \psi(x) | \gamma_i \gamma_5 | \psi(x) \rangle = \chi \langle \psi(x) | \gamma_i | \psi(x) \rangle = \langle \psi(x) | \gamma_5 \gamma_i | \psi(x) \rangle = -\langle \psi(x) | \gamma_i \gamma_5 | \psi(x) \rangle$ folgt $\langle \psi(x) | \gamma_i \gamma_5 | \psi(x) \rangle = 0$.

Es gibt demnach hadronische Korrelationsfunktionen, die Beiträge von den Nullmoden enthalten und andere, die komplett unabhängig von den Nullmoden sind. Wie der Tabelle 9.1 zu entnehmen ist, besitzt auch die Zeitkomponente des Axialvektorstroms $A_4 = \bar{\Psi} \gamma_4 \gamma_5 \Psi$ die korrekten Quantenzahlen des Pions. In diesem Fall tragen die Nullmoden nicht zu der Korrelationsfunktion des Pions bei. Der im Limes verschwindender Masse divergierende Beitrag der Nullmoden zu manchen Korrelationsfunktionen muß als ein Artefakt des endlichen Volumens und der Valenzquark-Approximation angesehen

werden. Vgl. dazu die Diskussion der Overlap-Simulationen in [187] und der Domain-Wall-Simulationen in [188]. Im dynamischen Fall gibt es im Limes verschwindender Quarkmasse keine Nullmoden. In der Valenzquark-Approximation skaliert der auf den Nullmoden basierende volumenabhängige Part der Korrelationsfunktion wie $1/\sqrt{V}$ [187] und sollte daher für größere Volumina unterdrückt werden.

9.3 Effektive Massen des Pions und des ρ -Mesons

Im Limes großer euklidischer Zeiten dominiert der Zustand kleinster Energie die Korrelationsfunktionen, so daß bei verschwindendem Impuls die Korrelationsfunktion eines Hadrons H mit Masse m_H asymptotisch folgende Form annimmt

$$C(t, \underline{p}) \xrightarrow[p=0]{t \rightarrow \infty} \langle 0 | \mathcal{O}_i | H \rangle \langle H | \mathcal{O}_f^\dagger | 0 \rangle e^{-am_H t} . \quad (9.10)$$

Dieses Verhalten gilt jedoch nur auf in zeitlicher Richtung unendlich ausgedehnten Gittern. Für endliche zeitliche Ausdehnung führen die in Zeitrichtung gesetzten antiperiodischen Randbedingungen auf dem Gitter dazu, daß neben dem sich von der Quelle zur Senke propagierenden Hadron zusätzlich auch noch ein in entgegengesetzter Richtung propagierender Zustand existiert. Unter Berücksichtigung dieses Zustandes gilt im Limes $t \rightarrow \infty$ und $(L_t - t) \rightarrow \infty$ für Mesonen

$$C(t, \underline{0}) = A(e^{-am_H t} + \epsilon_i \epsilon_f e^{-am_H(L_t - t)}) \quad (9.11)$$

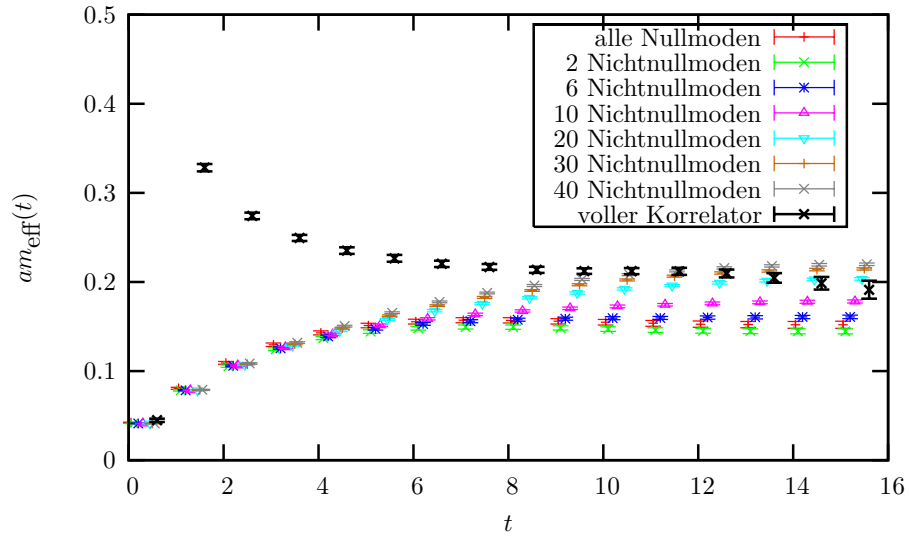
$$= 2Ae^{am_H \frac{L_t}{2}} \begin{cases} \cosh(am_H(\frac{L_t}{2} - t)) & \text{für } \epsilon_i \epsilon_f = +1 \\ \sinh(am_H(\frac{L_t}{2} - t)) & \text{für } \epsilon_i \epsilon_f = -1 \end{cases} , \quad (9.12)$$

wobei hierbei $\epsilon_{i,f}$ durch das Transformationsverhalten der Operatoren $\mathcal{O}_{i,f}$ unter Zeitinversion \mathcal{T} durch $\mathcal{T} \mathcal{O}_{i,f} \mathcal{T}^{-1} = \epsilon_{i,f} \mathcal{O}_{i,f}$ bestimmt ist.

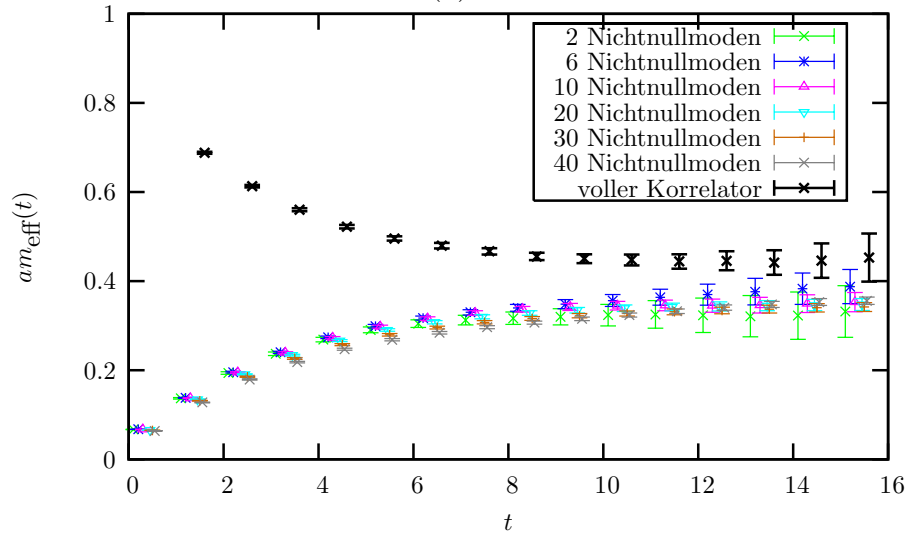
Die effektiven Massen am_{eff} bestimmen wir für alle t durch numerisches Lösen des folgenden Gleichungssystems mittels der Newton-Raphson-Methode [189]

$$\frac{C(t)}{C(t-1)} = \frac{e^{-am_{\text{eff}} t} + e^{-am_{\text{eff}}(L_t - t)}}{e^{-am_{\text{eff}}(t-1)} + e^{-am_{\text{eff}}(L_t - (t-1))}} . \quad (9.13)$$

Die Korrelationsfunktionen wurden hierbei zunächst symmetrisiert. Abbildung 9.3 zeigt die effektiven Massen des Pions und des ρ -Mesons. Im Falle



(a)



(b)

Abbildung 9.3: Die aus Fits der in Abbildung 9.1 gezeigten Propagatoren bestimmten effektiven Massen $am_{\text{eff}}(t)$ des Pions (a) bzw. des Vektormesons (b).

des vollen Korrelators fällt die effektive Masse zunächst ab und bildet ab $t \approx 8$ ein Plateau. Im trunkierten Fall steigt $m_{\text{eff}}(t)$ zunächst an und formt dann annähernd ein Plateau. Allein die Nullmoden steuern etwa bei $t = 12$ 73% der effektiven Pionmasse bei. Es sind lediglich $\gtrsim 20$ Moden notwendig, damit das Plateau der effektiven Masse des vollen Korrelators bei großen Zeitabständen erreicht wird.

Beim Vektormeson sind die Fehler der effektiven Massen der vollen Korrelationsfunktion deutlich größer als beim Pion. Unter Verwendung von 6 Nichtnullmoden sind die effektiven Massen der vollen und trunkierten Korrelationsfunktion bei großen Zeiten innerhalb ihrer großen Fehler kompatibel, für eine größere Anzahl von Moden werden die Massen des trunkierten Korrelators allerdings kleiner.

9.4 Die PCAC-Quarkmasse

Eine mögliche Definition der nackten Quarkmasse geht von der bereits in Abschnitt 1.2.2 betrachteten Ableitung von Flavour-Nichtsingulett-Strömen aus

$$\partial_\mu A_\mu(x) = 2m_q P(x). \quad (9.14)$$

Als Operatoridentität kann diese Gleichung auf einen geeigneten, zur Vermeidung von Kontakttermen nicht mit dem Axialvektorstrom und der pseudoskalaren Dichte überlappenden Operator \mathcal{O} angewendet werden.

Man erwartet dann, daß

$$\langle \partial_4 A_4(t) \mathcal{O} \rangle = 2am_{\text{PCAC}} \langle P(t) \mathcal{O} \rangle + \mathcal{O}(a^2) \quad (9.15)$$

mit $A_4(t) = \sum_{\underline{x}} A_4(\underline{x}, t)$ und $P(t) = \sum_{\underline{x}} P(\underline{x}, t)$ ist.

Verwendet man als Operator die über eine Zeitschicht gemittelte pseudoskalare Dichte, $\mathcal{O} = P(0) = \sum_{\underline{x}} P(\underline{x}, 0)$, so erhält man die unrenormierte PCAC-Quarkmasse

$$2am_{\text{PCAC}} = \frac{a\partial_4 \langle A_4(t) P(0) \rangle}{\langle P(t) P(0) \rangle}. \quad (9.16)$$

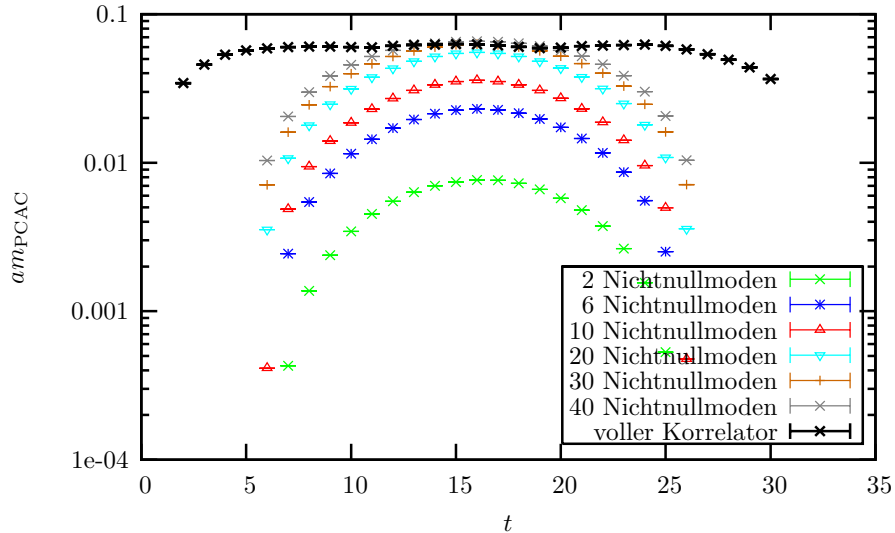


Abbildung 9.4: Die PCAC-Quarkmasse basierend auf den vollen Korrelationsfunktionen in (9.16) auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 8.45$ im Vergleich zu unterschiedlichen Trunkierungen.

Anhand von Wick-Kontraktionen kann dieser Term wieder durch Quarkpropagatoren ausgedrückt werden. Für den abzuleitenden Term im Zähler gilt

$$\langle \bar{\psi}(x) \gamma_4 \gamma_5 \psi(x) \bar{\psi}(0) \gamma_5 \psi(0) \rangle = -\text{Tr} \gamma_5 \gamma_4 \gamma_5 G \gamma_5 \gamma_5 G^\dagger = \text{Tr} \gamma_4 G G^\dagger, \quad (9.17)$$

während der Nenner der Korrelationsfunktion des Pions entspricht.

Abbildung 9.4 zeigt die PCAC-Quarkmasse basierend auf den vollen Korrelationsfunktionen in (9.16) im Vergleich zu unterschiedlichen Trunkierungen. Ohne Trunkierung entsteht im Bereich $t = 4, \dots, 27$ ein breites Plateau. Wie beim Vektormeson tragen die Nullmoden nicht zu der spektralen Entwicklung bei. Auch ohne ihren Beitrag sind nur $\gtrsim 30$ Nichtnullmoden notwendig, damit das Plateau der vollen PCAC-Quarkmasse bei großen Zeitabständen erreicht wird. Dies zeigt, daß die niedrigen Moden wichtige hadronische Observable wesentlich bestimmen.

Kapitel 10

Der Phasenübergang der QCD bei endlicher Temperatur

10.1 QCD bei endlicher Temperatur

QCD bei endlicher Temperatur kann mit Hilfe des Matsubara-Formalismus [190] zur Beschreibung statistischer Systeme endlicher Temperatur $T > 0$ definiert werden. Hierbei wird die Zeitvariable durch eine kompakte Koordinate $t = 0, \dots, aL_t$ ersetzt, die formal einer euklidischen Zeit entspricht – daher hier auch nicht anders gekennzeichnet werden soll – und mit der Temperatur T des Systems wie folgt zusammenhängt:

$$kT = \frac{\hbar}{aL_t} . \quad (10.1)$$

Die hierin auftretende Boltzmann-Konstante k und die Planck-Konstante \hbar werden im Folgenden stets Eins gesetzt.

Die Thermodynamik des Systems wird bei verschwindendem chemischen Potential im Kontinuum durch folgende kanonische Zustandssumme beschrieben

$$Z = \int DA_\mu D\bar{\Psi} D\Psi e^{-S_{\text{QCD}}(V_s, aL_t)} \quad (10.2)$$

mit der Wirkung

$$S_{\text{QCD}}(V_s, aL_t) = \int_0^{aL_t} dt \int_{V_s} d^3x \mathcal{L}_{\text{QCD}}(\bar{\psi}, \psi, A_\mu) . \quad (10.3)$$

V_s ist hierbei das physikalische räumliche Volumen. Die Felder $A_\mu(\underline{x}, t)$ bzw. $\bar{\Psi}(\underline{x}, t)$ und $\Psi(\underline{x}, t)$ sind auf dem kompakten Raum $\mathbb{R}^3 \times S^1$ definiert und erfüllen in Zeitrichtung periodische

$$A_\mu(\underline{x}, 0) = A_\mu(\underline{x}, aL_t) \quad (10.4)$$

bzw. antiperiodische

$$\Psi(\underline{x}, 0) = -\Psi(\underline{x}, aL_t) \quad (10.5)$$

$$\bar{\Psi}(\underline{x}, 0) = -\bar{\Psi}(\underline{x}, aL_t) \quad (10.6)$$

Randbedingungen.

Durch Diskretisierung von (10.2) kann eine Gittertheorie der QCD bei endlicher Temperatur definiert werden. Um auf dem Gitter approximativ den thermodynamischen Limes realisieren zu können, muß die Ausdehnung des Gitters in der zeitlichen Richtung deutlich kleiner sein als in den räumlichen Richtungen (vgl. Abschnitt 1.3).

Die Wirkung der reinen $SU(3)_c$ -Eichtheorie ist nicht nur unter periodischen Eichtransformationen invariant, sondern besitzt eine weitere Symmetrie, die globale $Z(3)$ -Symmetrie, die mit dem Zentrum der $SU(3)_c$ -Gruppe verbunden ist.

Unter dem Zentrum Z einer Gruppe G versteht man allgemein die Untergruppe von G , deren Elemente mit allen Elementen von G kommutieren:

$$Z(G) = \{z \in G \mid gz = zg, \forall g \in G\} . \quad (10.7)$$

Speziell im Falle der $SU(3)_c$ -Gruppe besteht das Zentrum $Z(3)$ aus den folgenden drei Elementen:

$$Z(SU(3)_c) = Z(3) = \{e^{-i\frac{2\pi}{3}} \mathbb{1}, e^{+i\frac{2\pi}{3}} \mathbb{1}, \mathbb{1}\} . \quad (10.8)$$

Multipliziert man all die Links in Zeitrichtung $U_4(\underline{x}, x_4)$, die von einem festen $x_4 = \text{const.}$ ausgehen, mit einem Element z des Zentrums der Gruppe

$$U_4(\underline{x}, x_4) \rightarrow zU_4(\underline{x}, x_4), \quad x_4 \text{ fest}, \quad z \in Z(3) , \quad (10.9)$$

so ist die gluonische Eichfeldwirkung invariant unter diesen $Z(3)$ -Transformationen. Dies gilt allgemein für alle Produkte von Link-Matrizen entlang einer geschlossenen Kurve, die die $x_4 = \text{const.}$ Hyperebene gleich oft in positiver und negativer Richtung $\hat{\mu} = \pm 4$ kreuzt.

Ein besonderer unter globalen $Z(3)$ -Transformationen nicht invarianter Loop ist der eichinvariante Polyakov-Loop [191, 192] $L(x)$, der im Kontinuum via

$$L(\underline{x}) = \mathcal{P} e^{ig \int_0^{L_t} dt A_4(\underline{x}, t)} \quad (10.10)$$

definiert ist, wobei \mathcal{P} der Pfadordnungsoperator ist.

Auf dem Gitter nimmt er die einfache Form einer Spur über das Produkt von in Zeitrichtung gerichteten und verbundenen Link-Variablen

$$L(\underline{x}) = \frac{1}{3} \text{Tr} \prod_{x_4=1}^{L_t} U_4(\underline{x}, x_4) \quad (10.11)$$

an und ist vermöge der periodischen Randbedingungen des Gitters geschlossen. Unter $Z(3)$ -Transformationen transformiert der Polyakov-Loop gemäß

$$L(\underline{x}) \rightarrow zL(\underline{x}) . \quad (10.12)$$

Die Bedeutung dieser Größe liegt darin, daß ihr Erwartungswert die freie Energie $F_q(T)$ des Systems bei Anwesenheit einer statischen Colour-Triplett-Quark-Testladung relativ zu der Energie des Systems bei Abwesenheit einer solchen mißt

$$e^{-F_q(T)/T} = |\langle L \rangle| . \quad (10.13)$$

Der über das räumliche Volumen L_s^3 gemittelte Polyakov-Loop L ist hierbei

$$L = \frac{1}{L_s^3} \sum_{\underline{x}} L(\underline{x}) . \quad (10.14)$$

Die freie Energie $F_{q\bar{q}}(T)$ eines statischen Quark-Antiquark-Paares relativ zum Vakuum ist durch die Korrelationsfunktion zweier Polyakov-Loops gegeben,

$$e^{-F_{q\bar{q}}(T)/T} = \langle L(\underline{x}) L^\dagger(\underline{x}') \rangle \xrightarrow{|\underline{x}-\underline{x}'| \rightarrow \infty} |\langle L \rangle|^2 \quad (10.15)$$

und sollte für große Abstände des Paares den Cluster-Mittelwert $|\langle L \rangle|^2$ annehmen. Im Confinement steigt die freie Energie bei Abwesenheit von dynamischen Quarks mit zunehmendem Abstand, so daß in der Valenzquark-Approximation in dieser Phase $\langle L \rangle = 0$ verschwinden muß. Entsprechend signalisiert ein nicht verschwindender Erwartungswert $\langle L \rangle \neq 0$ Deconfinement.

Der Polyakov-Loop fungiert damit in der Valenzquark-Approximation als Ordnungsparameter des Confinement/Deconfinement-Übergangs und beschreibt die wesentlichen thermodynamischen Freiheitsgrade.

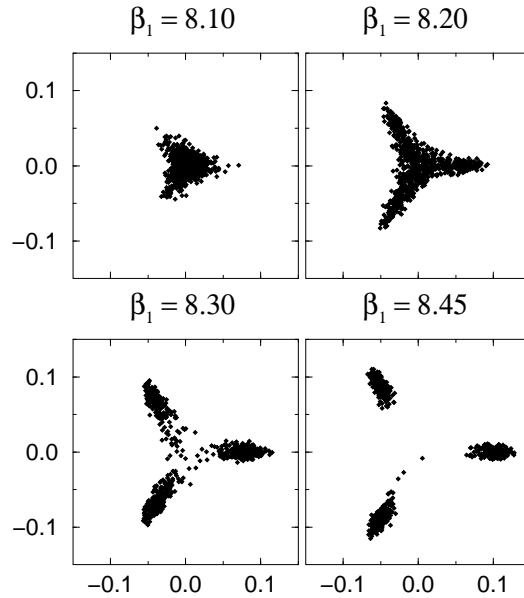


Abbildung 10.1: (aus [149]) Der Polyakov-Loop auf Konfigurationen in der Valenzquark-Approximation: Scatterplots des Polyakov-Loops für vier verschiedene Werte von β in der Umgebung des Phasenübergangs auf einem $16^3 \times 6$ -Gitter. Jeder Punkt stellt den über alle Gitterpunkte gemittelten Wert des Polyakov-Loops auf einer einzelnen unter Verwendung der Lüscher-Weisz-Wirkung generierten Konfiguration dar.

Integriert man alle anderen Freiheitsgrade heraus, so kann das kritische Verhalten des Phasenübergangs der QCD analog zu einem dreidimensionalen $Z(3)$ -Spin-System beschrieben werden. Obwohl $SU(N)_c$ -Eichtheorien im allgemeinen eine weit komplexere Struktur als $Z(N)$ -Spinsysteme haben, wurde von Svetitsky und Yaffe [193] postuliert, daß sie zur gleichen Universalitätsklasse gehören und beide auf der spontanen Brechung der globalen $Z(N)$ -Symmetrie basieren. Damit sollten universelle Größen, wie die Ordnung des Phasenübergangs oder die kritischen Exponenten in beiden Systemen übereinstimmen.

Analog zu der Magnetisierung in Spin-Modellen testet der Polyakov-Loop, ob die $Z(3)$ -Symmetrie der Lagrange-Dichte vom System realisiert bzw. spontan gebrochen wird. Im Confinement respektiert der Grundzustand die $Z(3)$ -Symmetrie, so daß Konfigurationen mit $z_i L(\underline{x})$, $z_i \in Z(3)$ gleichhäufig auftreten und $\langle L \rangle$ wegen $\sum_{i=1}^3 z_i = 0$ verschwindet. Im Deconfinement ist die $Z(3)$ -Symmetrie gebrochen und die Phase des gemittelten Polyakov-Loops sollte sich um eines der drei $Z(3)$ -Elemente ansammeln. Dieses Verhalten

wird in Simulationen in der Valenzquark-Approximation bestätigt. In dem Scatterplot 10.1 aus [149] sieht man, daß im Deconfinement (kleine β -Werte) der Polyakov-Loop $\langle L \rangle$ symmetrisch um den Ursprung streut, während er im Deconfinement (große β -Werte) Argumente einnimmt, die mit den $Z(3)$ -Werten übereinstimmen.

Die bisherigen Betrachtungen galten in der Valenzquark-Approximation. Die Hinzunahme dynamischer Quarks impliziert effektiv einen Term in der Lagrange-Dichte, der proportional zu dem Polyakov-Loop ist, so daß die Wirkung die $Z(3)$ -Symmetrie explizit bricht. Im dynamischen Fall fungiert der Polyakov-Loop damit nicht mehr als Ordnungsparameter, so daß er auch im Confinement einen endlichen Wert annimmt und im Deconfinement keine durch die $Z(3)$ -Symmetrie bestimmte Struktur zeigen sollte. In Abb. 10.7 werden wir sehen, daß dies bei den von uns durchgeführten dynamischen Simulationen in der Tat der Fall ist.

Allerdings sollte auch im dynamischen Fall der Polyakov-Loop einen raschen Wechsel zwischen den Phasen zeigen, so daß er auch hier zur Bestimmung der kritischen Temperatur Verwendung findet.

10.2 Die Ordnung des Phasenübergangs

Trotz enormer theoretischer Anstrengungen ist die Natur und die Ordnung des Phasenübergangs der QCD noch unbekannt. Auch konnte noch nicht endgültig geklärt werden, ob der chirale Phasenübergang und der Confinement/Deconfinement-Übergang exakt übereinstimmen. Für die Grenzfälle verschwindender Quarkmassen im chiralen Limes oder unendlicher Massen in der Valenzquark-Approximation ist das Bild klarer geworden, jedoch ist die genaue Phasenstruktur der QCD eine komplizierte Funktion des Parameter-Raumes $\{m_{u,d}, m_s, T, \mu\}$.

Da nicht zu erwarten ist, daß die schweren Quarks c, b, t einen Einfluß auf das thermodynamische Verhalten des Systems haben, werden sie im allgemeinen nicht berücksichtigt. Auch wollen wir uns im Rahmen dieser Arbeit auf die Thermodynamik bei verschwindendem chemischen Potential μ beschränken.

Theoretische Prognosen der Ordnung des Phasenübergangs basieren auf Universalitätsüberlegungen und Analogien zu einfachen Spin-Modellen. Die auf Grund dieser Analogie des kritischen Verhaltens prognostizierte Ordnung des Phasenübergangs ist stark von der Masse der Quarks abhängig. Die

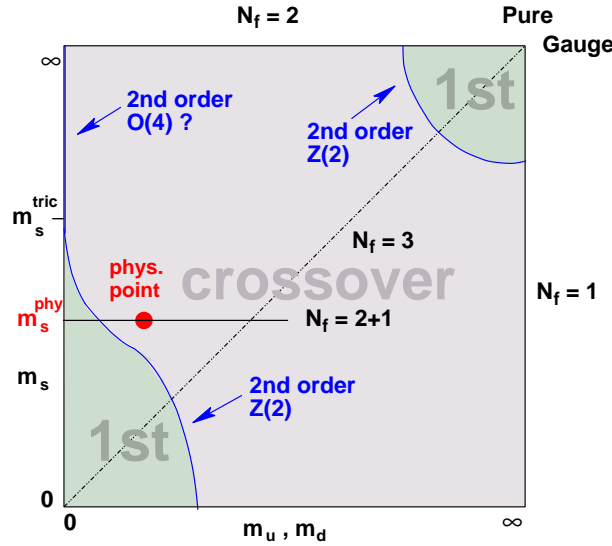


Abbildung 10.2: (aus [194]) Skizze des Phasendiagramms der QCD mit $N_f = 2 + 1$ Flavours in der $m_{u,d}-m_s$ -Ebene bei $\mu = 0$.

Abhängigkeit der Ordnung des Phasenübergangs von der Masse der leichten Quarks $m_{u,d}$ und der des schwereren s-Quarks m_s soll beziehend auf Abbildung 10.2 im Folgenden kurz diskutiert werden.

- $m_q = \infty$ (**Valenzquark-Approximation**)

In der Valenzquark-Approximation unendlich schwerer Quarks fungiert der Polyakov-Loop $\langle L \rangle$ als Ordnungsparameter des Confinement / Deconfinement-Übergangs und unterscheidet die $Z(3)$ -symmetrische Phase unterhalb T_c von der Phase mit spontan gebrochener globaler $Z(3)$ -Symmetrie oberhalb T_c

$$\langle L \rangle \begin{cases} = 0 & \text{für } T < T_c \text{ (Confinement, } Z(3)\text{-Symm. realisiert)} \\ \neq 0 & \text{für } T > T_c \text{ (Deconfinement, } Z(3)\text{-Symm. gebrochen) .} \end{cases} \quad (10.16)$$

Basierend auf der Analogie zu dem Ordnungs/Unordnungs-Übergang eines dreidimensionalen **Z(3)-Spin-Modells** (Potts-Modell) wurde von Svetitsky und Yaffe [193] prognostiziert, daß der **Phasenübergang 1. Ordnung** ist.

- $m_q = 0$ (**chiraler Limes**)

Im chiralen Limes verschwindender Quarkmassen fungiert das chirale Kondensat $\langle \Sigma \rangle$ als Ordnungsparameter des chiralen Phasenüber-

gangs und unterscheidet die Phase spontan gebrochener globaler chiraler Symmetrie unterhalb von T_c von der chiral symmetrischen Phase oberhalb T_c

$$\langle \Sigma \rangle \begin{cases} \neq 0 & \text{für } T < T_c \text{ (chir. Symmetrie spontan gebrochen)} \\ = 0 & \text{für } T > T_c \text{ (chir. Symmetrie realisiert)} . \end{cases} \quad (10.17)$$

Basierend auf der Analogie zu linearen σ -Modellen wurde von Pisarski und Wilczek [195] prognostiziert, daß die Ordnung des Phasenübergangs von der Anzahl N_f der Flavours abhängt.

Folgende Fälle sind zu unterscheiden:

– $N_f = 1$ (**chiraler Limes**)

Im Falle nur eines masselosen Quark-Flavours existiert **kein Phasenübergang**, allenfalls ein Crossover.

– $N_f = 2$ (**chiraler Limes**)

Im Falle von zwei masselosen Quark-Flavours hängt die Ordnung des Phasenübergangs von der Stärke der anomalen Kopplung $c(T)$ ab. Diese Kopplung wurde in den Modellrechnungen in [195] eingeführt, um die eventuelle effektive Restaurierung der axialen $U(1)_A$ -Symmetrie bei hohen Temperaturen zu beschreiben.

* Ist $c(T_c) \approx c(0)$, bleibt das η' auch oberhalb von T_c massiv und das kritische Verhalten des chiralen Phasenübergangs entspricht dem eines **3d O(4)-Heisenberg-Modells**. In diesem Fall ist der **Phasenübergang 2. Ordnung** und besitzt dieselben kritischen Exponenten wie das Heisenberg-Modell. $N_f = 2$ Flavours ist der einzige Fall im chiralen Limes, in dem prinzipiell ein Übergang zweiter Ordnung stattfinden kann.

* Ist $c(T_c) \ll c(0)$, würde die $U_A(1)$ -Symmetrie nahezu restauriert werden (leichtes η'), und das kritische Verhalten wäre das eines **O(2)×O(4)-Modells** mit einem **Phasenübergang 1. Ordnung**.

– $N_f \geq 3$ (**chiraler Limes**)

Im Falle von drei oder mehr masselosen Flavours tritt ein **Phasenübergang 1. Ordnung** auf.

- $0 < m_q < \infty$ (**physikalische Quarkmassen**)

Im realistischen Fall endlicher nichtverschwindender Quarkmassen ist die chirale Symmetrie explizit gebrochen, so daß das chirale Kondensat $\langle \Sigma \rangle$ kein wirklicher Ordnungsparameter ist. Da der fermionische Beitrag zu der Wirkung auch die $Z(3)$ -Symmetrie bricht, muß der Polyakov-Loop in der Confinement-Phase nicht verschwinden und stellt daher auch keinen wirklichen Ordnungsparameter dar. Trotzdem sollten sowohl der Polyakov-Loop als auch das chirale Kondensat in der Nähe des Übergangs einen raschen Wechsel zeigen.

Wie der Abbildung 10.2 zu entnehmen ist, erwartet man im Bereich kleiner bzw. großer Quarkmassen (linke untere bzw. rechte obere Ecke des Diagramms) einen Phasenübergang 1. Ordnung. Da für mittlere Quarkmassen bei Simulationen ein Crossover beobachtet wurde, muß der Bereich des Übergangs 1. Ordnung durch eine Linie mit Übergängen 2. Ordnung von dem Bereich des Crossover getrennt sein.

Je nach der genauen Größe der u-, d- und s-Massen kann es sich bei dem QCD-Übergang also um einen Phasenübergang 1. oder 2. Ordnung handeln, oder auch nur um einen raschen Crossover, der keine Singularitäten aufzeigt.

Die obigen Prognosen der Ordnung des Phasenübergangs basieren lediglich auf Universalitätsüberlegungen und der Analogie des kritischen Verhaltens mit einfacheren Spinsystemen. Um zu einer endgültigen Aussage über die Natur und die Ordnung des Phasenübergangs zu kommen, sind nichtperturbative Gitter-Simulationen nötig. Da Gitter-Rechnungen stets im endlichen Volumen durchgeführt werden, können keine Singularitäten und damit keine wirklichen Phasenübergänge simuliert werden. Methoden zur Bestimmung der Ordnung des Phasenübergangs sind die Untersuchung des Skalierungsverhaltens von Peaks in Suszeptibilitäten, von Binder-Kumulanten oder der Imaginärteile von Lee-Yang-Nullstellen. Die meisten Simulationen deuten an, daß der QCD-Phasenübergang bei physikalischen Quarkmassen ein analytischer Crossover ist [196, 197]. Ein Übergang 2. Ordnung ist jedoch nicht ausgeschlossen und einige neue Untersuchungen mit $N_f = 2$ Staggered-Fermionen deuten sogar auf einen Übergang 1. Ordnung hin [198].

10.3 Die kritische Temperatur des Übergangs

Obwohl bei endlichen Quarkmassen weder Polyakov-Loop noch chirales Kondensat wirklich Ordnungsparameter sind, sollten beide Größen in der Nähe des Übergangs einen raschen Wechsel zeigen. Ihre Suszeptibilitäten sollten hierbei Peaks zeigen, die allgemein zur Definition des Übergangspunktes verwendet werden können.

Abbildung 10.3 zeigt einen Vergleich der von verschiedenen Kollaborationen mit unterschiedlichen Wirkungen und Methoden bestimmten kritischen Temperatur T_c . Quadratische Symbole zeigen in dieser Grafik, daß die kritische Temperatur durch die Messung gluonischer, d.h. etwa mit dem Polyakov-Loop in Verbindung stehender Signale gemessen wurde. Runde Symbole deuten an, daß Observable, die mit der chiralen Symmetrie in Verbindung stehen zur Bestimmung von T_c verwendet wurden, während sechseckige Symbole die Verwendung beider Methoden symbolisieren. Während die vier obersten Datensätze innerhalb ihrer teils großen Fehler zusammenpassen, fällt bei den zuunterst gezeigten Daten der Kollaboration um Z. Fodor [196] auf, daß der über die chirale Suszeptibilität bestimmte Wert deutlich kleiner ist als der mit gluonischen Methoden gewonnene.

Dies kann als Hinweis interpretiert werden, daß der Phasenübergang evtl. ein relativ breiter Crossover ist und es daher keinen festen Wert der kritischen Temperatur gibt, sondern nur einen breiten Temperaturbereich, in dem verschiedene Übergangsphänomene stattfinden [196, 206]. Dieses Verhalten wäre analog zu dem von Wasser und Dampf jenseits des kritischen Punktes. Wie Abbildung 10.4 verdeutlicht, wird entlang der Linie erster Ordnung der Unterschied der beiden koexistierenden Phasen Wasser und Dampf immer geringer, so daß jenseits des kritischen Punktes bei $T_c = 374^\circ$, $p_c = 22.064$ MPa (mit einem Übergang 2. Ordnung) nur noch ein Crossover zwischen Wasser und Dampf besteht. Während im Bereich des Phasenübergangs unterschiedliche Definitionen der kritischen Temperatur, etwa basierend auf Peaks der Ableitung der Dichte nach der Temperatur $d\rho/dT$ oder der spezifischen Wärme c_p bei festem Druck, den gleichen Wert für T_c liefern, führen im Bereich des Crossovers diese unterschiedlichen Definitionen zu unterschiedlichen Werten von T_c . Sollte es sich bei dem QCD-Übergang um einen analytischen Crossover handeln, so ist auch hier zu erwarten, daß unterschiedliche Methoden und Definitionen zur Bestimmung der kritischen Temperatur unterschiedliche Werte liefern.

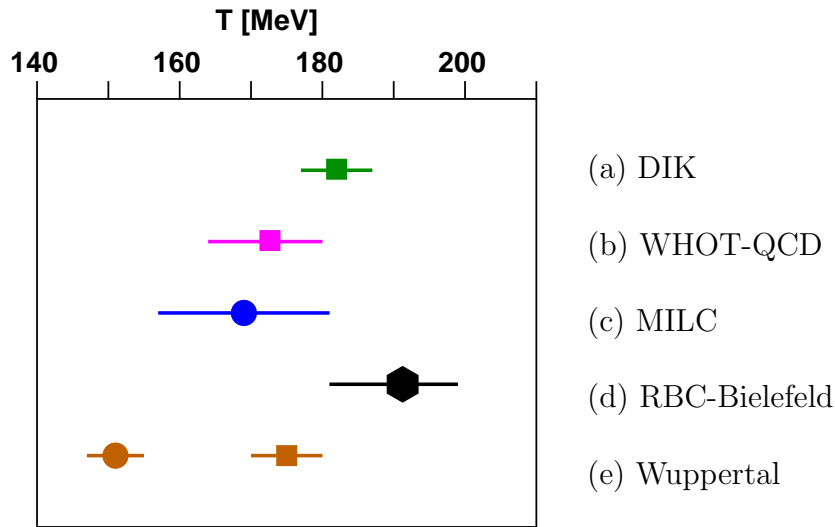


Abbildung 10.3: (aus [199]) Vergleich der von verschiedenen Kollaborationen mit unterschiedlichen Wirkungen und Methoden bestimmten kritischen Temperatur T_c . Quadratische Symbole zeigen in dieser Grafik, daß die kritische Temperatur durch die Messung gluonischer, d.h. etwa mit dem Polyakov-Loop in Verbindung stehender Signale gemessen wurde. Runde Symbole deuten an, daß Observable, die mit der chiralen Symmetrie in Verbindung stehen, wie die chirale Suszeptibilität, zur Bestimmung von T_c verwendet wurden, während sechseckige Symbole die Verwendung beider Methoden symbolisieren. Zum Vergleich wurden die Ergebnisse auf eine einheitliche physikalische Skala mit $r_0 = 0.469$ [200] reskaliert. Die Details zu den angegebenen Wirkungen sind den jeweiligen Referenzen zu entnehmen.

(a) V. Bornyakov *et al.* (DIK-Kollaboration) [201, 202, 203]: $N_f = 2$ Wilson/Clover-Fermionen, Wilson-Eichfeldwirkung, Gitter mit $L_t = 8, 10, 12$ (in dieser Arbeit verwendet).

(b) Y. Maezawa *et al.* (WHOT-QCD-Kollaboration) [204]: $N_f = 2$ Wilson/Clover-Fermionen, Iwasaki-verbesserte Eichfeldwirkung, Gitter mit $L_t = 4, 6$.

(c) C. Bernard *et al.* (MILC-Kollaboration) [197]: $N_f = 3, 2+1$ Asqtad-verbesserte Staggered-Fermionen, Symanzik-verbesserte Eichfeldwirkung, $L_t = 4, 6, 8$.

(d) M. Cheng *et al.* (RBC-Bielefeld-Kollaboration) [205]: $N_f = 2 + 1$ verbesserte Staggered-Fermionen („p4fat3-Wirkung“), $\mathcal{O}(a^2)$ -verbesserte Eichfeldwirkung, $L_t = 4, 6$.

(e) Y. Aoki *et al.* (Wuppertal) [196]: $N_f = 2+1$ Stout-Link-verbesserte Fermionen, $\mathcal{O}(a^2)$ -verbesserte Eichfeldwirkung, $L_t = 4, 6, 8, 10$.

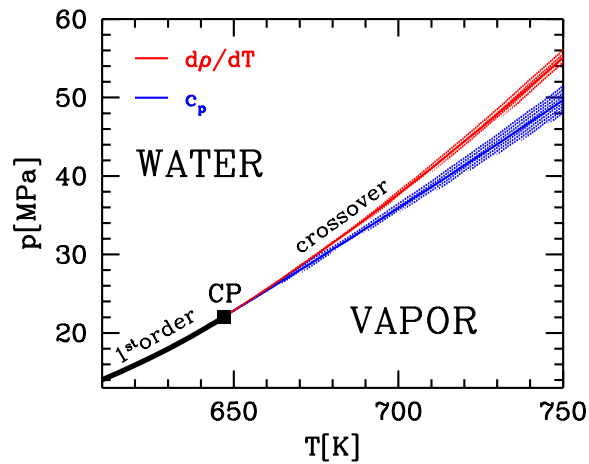


Abbildung 10.4: (aus [196]) Phasendiagramm von Wasser in der Umgebung des kritischen Punktes (CP). Während der Übergang zwischen Dampf und Wasser für $T < T_c = 374^\circ$ und $p < p_c = 22.064$ MPa ein singulärer Phasenübergang erster Ordnung ist, werden diese beiden Phasen jenseits des kritischen Punktes nur durch einen raschen Crossover verbunden. Charakteristisch für einen Crossover ist, daß unterschiedliche Definitionen der kritischen Temperatur (hier mit Fehlerband gezeigt für die Ableitung der Dichte nach der Temperatur ($d\rho/dT$) und die spezifische Dichte (c_p)) unterschiedliche Werte liefern.

10.4 Simulationen der DIK-Kollaboration

In den Simulationen der DIK-Kollaboration bei endlicher Temperatur werden dynamische Konfigurationen verwendet, die mit der Wilson-Eichfeldwirkung und $N_f = 2$ degenerierten nichtperturbativ verbesserten Wilson/Clover-Fermionen mit der Wirkung (1.100) generiert wurden. Der Clover-Koeffizient c_{sw} wurde für $\beta \geq 5.20$ nichtperturbativ bestimmt [59].

Verwendet werden von der DIK-Kollaboration Konfigurationen auf einem $16^3 \times 8$ -Gitter (bei $\beta = 5.20$ und 5.25) [201], einem $24^3 \times 10$ -Gitter bei $\beta = 5.20$ [202] sowie seit kurzem einem $24^3 \times 12$ -Gitter bei $\beta = 5.29$ [203]. In Abbildung 10.5 werden diese Simulationenpunkte in der β - κ -Ebene gezeigt. Eingezeichnet sind ebenso Linien mit konstanten Werten von m_π/m_ρ bzw. r_0/a , die von der QCDSF-Kollaboration bei $T = 0$ berechnet wurden [86].

Da für dynamische Konfigurationen der Gitterabstand a sowohl von der Kopplung β als auch von dem mit der Masse der Seaquarks in Verbindung stehenden Hoppingparameter $\kappa = \kappa_{\text{sea}}$ abhängt, kann die Temperatur

$$T = \frac{1}{L_t a(\beta, \kappa)} \quad (10.18)$$

bei festem β durch Vergrößerung von κ erhöht werden.

Die von der DIK-Kollaboration bei der Generierung der dynamischen Konfigurationen auf den unterschiedlichen Gittern verwendeten Simulationsparameter sind in Tabelle 10.1 zusammengestellt.

$L_s^3 \times L_t$	β	κ_t	$r_0 T_c$	κ
$16^3 \times 8$	5.20	0.13444(6)	0.499(5)	0.1330, 0.1335, 0.1340, 0.1343, 0.1344, 0.1345, 0.1348, 0.1355, 0.1360
$16^3 \times 8$	5.25	0.13406(6)	0.537(5)	0.1330, 0.1335, 0.13375, 0.1339, 0.1340, 0.1341, 0.13425, 0.1345, 0.1350
$24^3 \times 10$	5.20	0.13542(6)	0.499(5)	0.1348, 0.1352, 0.1353, 0.1354, 0.1355, 0.1356, 0.1358, 0.1360
$24^3 \times 12$	5.29	0.13589(6)	0.487(6)	0.1357, 0.1358, 0.1359, 0.1360, 0.1361

Tabelle 10.1: Simulationsparameter der DIK-Kollaboration: Das Gittervolumen, die Kopplung β und die verschiedenen Werte für κ . Ferner die aus der Polyakov-Loop-Suszeptibilität bestimmten Werte der kritischen Kopplung κ_t sowie der kritischen Temperatur $r_0 T_c$.

In der Vergangenheit wurde die kritische Temperatur von der DIK-Kollaboration stets basierend auf dem Polyakov-Loop bestimmt. Um eine Vorstellung der lokalen Verteilung des Polyakov-Loops $L(\underline{x})$ zu geben, zeigen wir in Abbildung 10.6 (a) einen Scatterplot der lokalen Werte von $3L(\underline{x})$ auf einer einzigen Testkonfiguration auf dem $24^3 \times 10$ -Gitter. Die Punkte füllen komplett ein Gebiet aus, dessen drei Ecken durch die Werte $z_i \in Z(3)$ gegeben sind. Dieses sich deutlich abzeichnende „Fundamentaldreieck“ ist der mögliche kompakte Wertebereich der Spur einer $SU(3)$ -Matrix und durch $e^{i\phi_1} + e^{i\phi_2} + e^{-i(\phi_1+\phi_2)}$ mit $0 \leq \phi_1, \phi_2 \leq 2\pi$ gegeben. Die Verteilung der lokalen Werte auf dieses Fundamentaldreieck ist in Abbildung 10.6 (b) gezeigt. Wesentlich zur Charakterisierung des Phasenübergangs ist der über das Volumen gemittelte Wert L (10.14) und dessen Ensemble-Mittel.

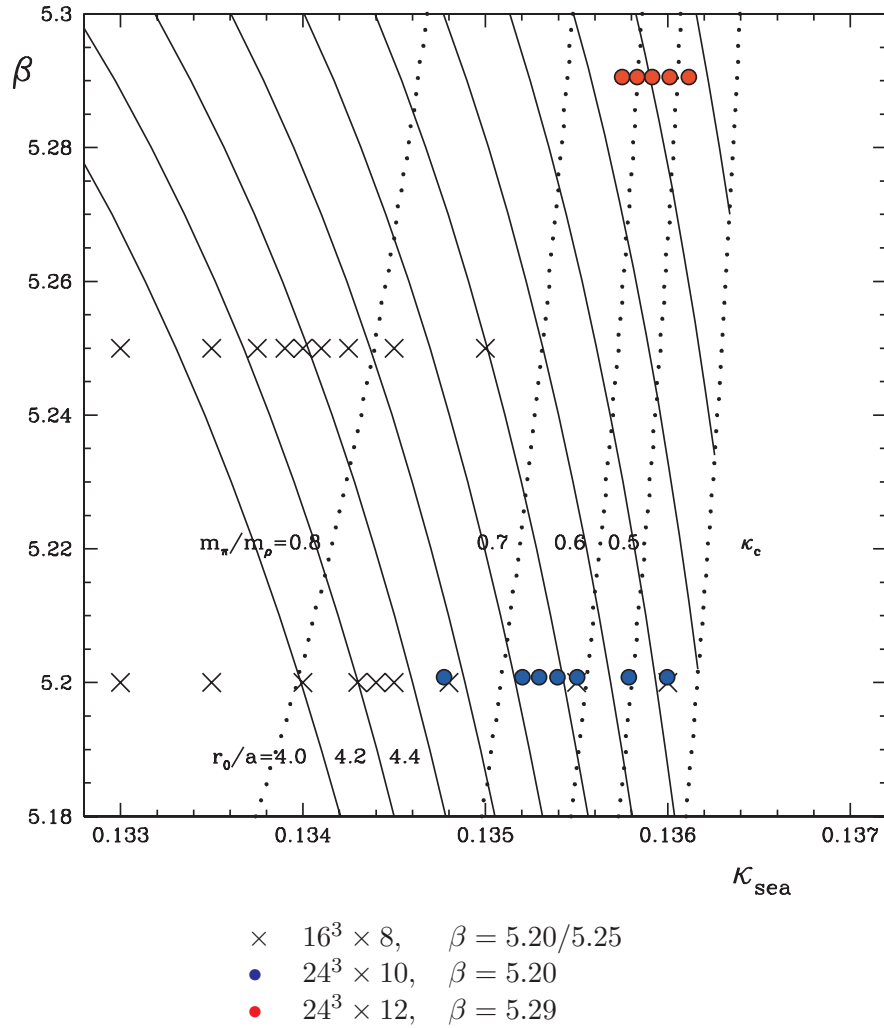


Abbildung 10.5: Simulationsparameter der DIK-Kollaboration in der β - κ -Ebene. Die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Parameterwerte auf dem $24^3 \times 10$ -Gitter werden mit blauen Kreisen gekennzeichnet. Schwarze Kreuze bzw. rote Kreise markieren Parameterwerte, bei denen ebenfalls von der DIK-Kollaboration Simulationen auf einem $16^3 \times 8$ bzw. $24^3 \times 12$ -Gitter durchgeführt wurden, die in dieser Arbeit aber nicht näher behandelt werden. Die gestrichelten bzw. durchgezogenen Linien kennzeichnen Parameter mit konstanten Werten von m_π/m_ρ bzw. r_0/a bei $T = 0$.

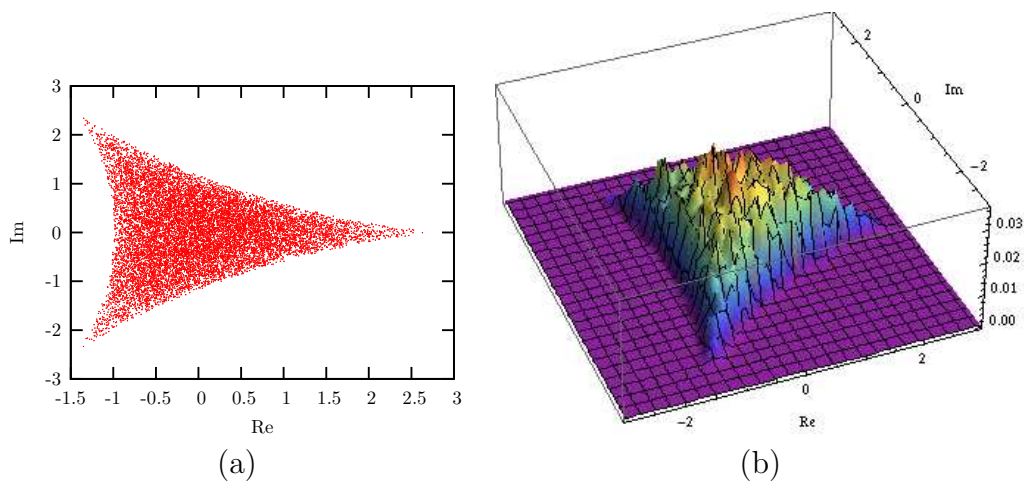


Abbildung 10.6: Scatterplot (a) und Verteilung (b) des Polyakov-Loops $3L(\underline{x})$ auf den kompakten Wertebereich der Spur einer $SU(3)$ -Matrix in der komplexen Ebene für $\kappa = 0.1360$ ($T > T_c$) auf dem $24^3 \times 10$ -Gitter bei $\beta = 5.20$.

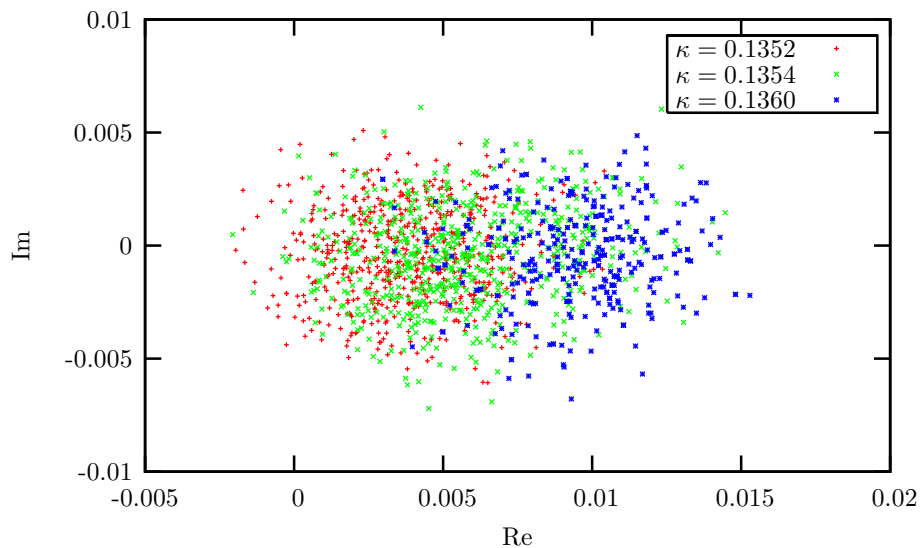


Abbildung 10.7: Scatterplots des Polyakov-Loops $L(\underline{x})$ in der komplexen Ebene für $\kappa = 0.1352$ ($T < T_c$), $\kappa = 0.1354$ ($T \approx T_c$) und $\kappa = 0.1360$ ($T > T_c$) auf dem $24^3 \times 10$ -Gitter bei $\beta = 5.20$. Jeder Punkt stellt den über alle Gitterpunkte gemittelten Wert des Polyakov-Loops auf einer einzelnen Konfiguration dar.

Abbildung 10.7 zeigt einen Scatterplot von L für $\mathcal{O}(400)$ Konfigurationen für drei verschiedene κ -Werte in der Umgebung des Phasenübergangs. Man sieht, daß selbst für den kleinsten κ -Wert der Realteil des Polyakov-Loop nicht symmetrisch um Null verteilt ist. Dies ist auf die explizite Brechung der $Z(3)$ -Symmetrie der Wirkung durch die Hinzunahme dynamischer Quarks zurückzuführen. Die Abbildung zeigt ferner, daß sich die Verteilung des mittleren Polyakov-Loops mit anwachsender Temperatur, d.h. größer werdendem κ zu größeren realen Werten verschiebt. Eine wie in der Valenzquark-Approximation zu beobachtende Ballung der Werte bei größeren Temperaturen entlang der durch die $Z(3)$ -Wurzeln vorgegebenen Achsen (vgl. Abbildung 10.1) ist nicht erkennbar. Die Abbildung zeigt ferner, daß sich die Verteilung des mittleren Polyakov-Loops mit anwachsender Temperatur, d.h. größer werdendem κ zu größeren realen Werten verschiebt.

Der über alle Konfigurationen gemittelte Wert des Polyakov-Loops L zeigt über dem betrachteten Temperaturintervalle einen raschen Anstieg (vgl. Abbildung 10.9), seine Suszeptibilität

$$\chi_L = L_s^3 \sum_{\underline{s}} (\langle L^2(\underline{s}) \rangle - \langle L(\underline{s}) \rangle^2) \quad (10.19)$$

einen Peak, der zur Bestimmung der kritischen Temperatur T_c verwendet werden kann. Die durch das Fitten des Maximums von χ_L mit einem Gauß'schen Fit ermittelten kritischen Temperaturen auf den unterschiedlichen Ensembles der DIK-Kollaboration sind in Abbildung 10.8 eingezeichnet.

Um die kritische Temperatur in den Kontinuums-Limes und zu physikalischen Pionmassen m_π zu extrapolieren, wird in [203] folgender Fitansatz verwendet

$$r_0 T_c(r_0 m_\pi, 1/L_t) = r_0 T_c(0, 0) + c_N \frac{1}{L_t^2} + c_m (r_0 m_\pi)^d. \quad (10.20)$$

Unter der in [203] gemachten Annahme, daß der Übergang im chiralen Limes 2. Ordnung ist und in die Universalitätsklasse eines dreidimensionalen $O(4)$ -Spin-Modells fällt, hat der kritische Exponent d den Wert 1.08. Die Werte der kritischen Exponenten $d = \frac{2}{\beta\delta}$ konnten in Monte-Carlo-Simulationen des dreidimensionalen $O(4)$ -Heisenberg-Modells bestimmt werden [207, 208]. Im Falle eines Übergangs erster Ordnung würde $d = 2$ gelten. Der Unterschied zwischen Fits mit $d = 1.08$ und $d = 2$, ebenso wie eine andere mögliche Kontinuums-Extrapolation wurde in [203] zur Berechnung des systematischen Fehlers berücksichtigt. Die Fits für $L_t = 8, 10, 12$ und ∞ sind ebenso in Abbildung 10.8 eingezeichnet.

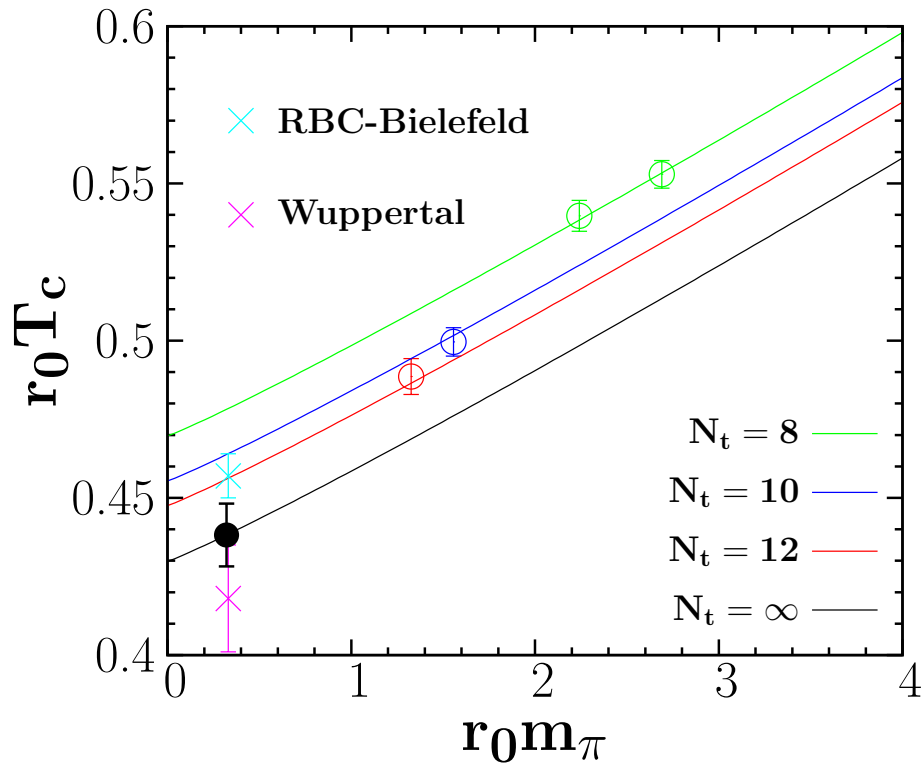


Abbildung 10.8: (aus [203]) Vergleich der von der DIK-Kollaboration bestimmten kritischen Temperatur $r_0 T_c$ im Kontinuums-Limes bei physikalischer Pionmasse (schwarzer Punkt) mit Ergebnissen der RBC-Bielefeld-Kollaboration [205] (hellblaues Kreuz) und den gluonischen Ergebnissen von Aoki *et al.* (Wuppertal) [196] (violette Kreuz). Eingezeichnet sind ferner die von der DIK-Kollaboration auf dem $16^3 \times 8$, $24^3 \times 10$ und $24^3 \times 12$ -Gitter bestimmten Werte der kritischen Temperaturen in Abhängigkeit von der Pionmasse. Die durchgezogenen Linien sind Fits nach Formel (10.20).

Im Kontinuums-Limes liefert der Fit bei physikalischen Massen einen Wert von

$$r_0 T_c(r_0 m_\pi^{\text{ph}}) = 0.438(6)_{(-7)}^{(+13)}, \quad (10.21)$$

wobei der erste angegebene Fehler der statistische und der zweite der systematische Fehler ist [203]. Innerhalb seiner Fehler ist er, wie aus Abbildung 10.3 und 10.8 ersichtlich, konsistent mit den von anderen Kollaborationen ermittelten kritischen Temperaturen.

Der basierend auf der chiralen Suszeptibilität bestimmte Wert von Aoki *et al.* [196] ist jedoch deutlich geringer, was uns reizte, im Rahmen dieser Arbeit fermionische Signale des Phasenübergangs näher zu untersuchen.

10.5 Parameter der Simulationen mit Valenz-Overlap-Fermionen

Die Bestimmung der kritischen Temperatur des QCD-Phasenübergangs durch die DIK-Kollaboration beruht allein auf dem gluonischen Signal des Polyakov-Loops. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sollen die fermionischen, mit dem chiralen Phasenübergang in Verbindung stehenden Aspekte des Übergangs näher untersucht werden. Aufgrund der guten chiralen Eigenschaften sind Overlap-Fermionen hierzu besonders geeignet. Wir verwenden daher in einem hybriden Ansatz Valenz-Overlap-Fermionen auf dynamischen Konfigurationen, deren Seequarks mit der Wilson/Clover-Wirkung simuliert werden.

Da Simulationen mit realistischen dynamischen Ginsparg-Wilson-Fermionen auch heute noch zu aufwendig sind, haben derartige hybride Simulationen mit sog. gemischten Wirkungen in letzter Zeit große Popularität gewonnen. Verwendet werden etwa Domain-Wall-Valenzquarks auf Konfigurationen mit dynamischen Staggered-Quarks [209, 210, 211], Overlap-Valenzquarks auf Staggered-Konfigurationen [212] oder auch Overlap-Valenzquarks auf dynamischen Konfigurationen mit Twisted-Mass-Fermionen [213]. Eine Untersuchung gemischter Wirkungen aus der Sicht der chiralen effektiven Störungstheorie ist in [214] zu finden.

Erste Erfahrungen unsererseits mit Valenz-Overlap-Fermionen auf dem $16^3 \times 8$ -Gitter bei $\beta = 5.20$ mit Wilson/Clover-Seequarks wurden in [W3] veröffentlicht. Um den Rahmen der Arbeit nicht zu sprengen, wollen wir uns im Folgenden auf die Beschreibung der Simulationsergebnisse auf dem $24^3 \times 10$ -Gitter bei $\beta = 5.20$ beschränken [W8].

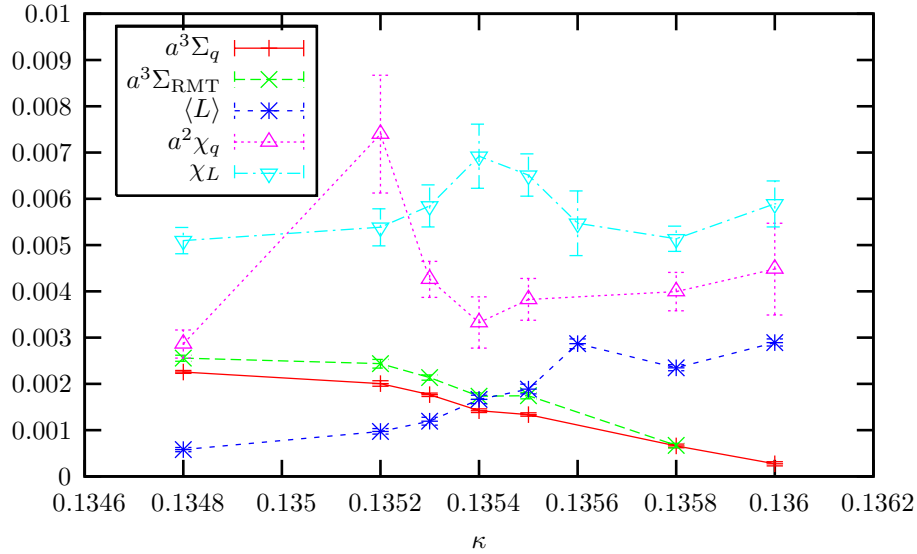


Abbildung 10.9: Der Polyakov-Loop $\langle L \rangle$ und seine Suszeptibilität χ_L zusammen mit den chiralen Kondensaten $\Sigma_q, \Sigma_{\text{RMT}}$ und der chiralen Suszeptibilität χ_q . $\Sigma_q(m_q)$ und χ_q werden hierbei aus der 50 Eigenmoden berücksichtigenden spektralen Entwicklung des chiralen Kondensats bestimmt. Σ_{RMT} hingegen beruht auf dem Fitten der spektralen Dichte mit Formeln der Zufallmatrixtheorie. Die Werte für die beiden Kondensate Σ_q und Σ_{RMT} stimmen ohne Reskalierung recht gut überein. Um die anderen Kurven in demselben Bild zeigen zu können, wurden sie mit einem geeignet gewählten Normierungsfaktor skaliert.

Abbildung 10.9 zeigt für diese Simulationsparameter u.a. den Polyakov-Loop und seine Suszeptibilität. Ein Gauß'scher Fit in der Umgebung des Maximums der Polyakov-Loop-Suszeptibilität liefert folgenden kritischen Wert [202]

$$\kappa_t = 0.13542(6); \quad r_0 T_c = 0.499(5) . \quad (10.22)$$

Gitterresultate des Sommer-Parameters sind leider noch sehr uneinheitlich. Etwa verwendet die RBC-Bielefeld-Kollaboration den von Gray *et al.* basierend auf der Massenaufspaltung des Bottoniums bestimmten Wert $r_0 = 0.469(7)$ fm [200], während die CP-PACS/JLQCD-Kollaboration in einer Studie des Spektrums leichter Hadronen einen Wert $r_0 = 0.516(21)$ fm ermittelt hat [215]. Um unsere Ergebnisse unabhängig von diesen Unsicherheiten zu diskutieren, werden wir daher alle Größen in Einheiten von r_0 angeben.

Die Anzahl der in der Overlap-Analyse verwendeten Konfigurationen, zusammen mit Werten für T/T_c und r_0/a sind in Tabelle 10.2 zusammengefaßt.

κ	# confs	T/T_c	r_0/a
0.1348	131	0.91	4.561
0.1352	86	0.97	4.832
0.1353	131	0.98	4.902
0.1354	97	1.00	4.973
0.1355	118	1.01	5.045
0.1358	122	1.06	5.265
0.1360	97	1.09	5.417

Tabelle 10.2: Parameter der Simulationen bei endlicher Temperatur auf dem $24^3 \times 10$ -Gitter bei $\beta = 5.20$. Gezeigt werden für jeden κ -Wert die Anzahl der Konfigurationen, die Temperatur T im Verhältnis zu T_c (bestimmt anhand der Polyakov-Loop-Suszeptibilität) sowie interpolierte Werte für den Sommer-Parameter r_0/a .

Für jede Konfiguration wurden die niedrigstliegenden 50 Eigenmoden des masselosen Overlap-Operators berechnet. Wie auch bei den Simulationen bei $T = 0$ erweist sich eine negative Masse $\rho = 1.4$ im Wilson-Kernel als guter Kompromiß zwischen guter Konditionierung des hermiteschen Wilson-Operators und guten Lokalisierungseigenschaften des Overlap-Operators. Da im Folgenden viele Ergebnisse in Abhängigkeit von der Anzahl der verwendeten Moden diskutiert werden, wird zur Orientierung in Tabelle 10.3 der Ensemble-Mittelwert ausgewählter Eigenwerte, sowohl in Gittereinheiten, als auch in Einheiten von r_0 für alle behandelten κ -Werte angegeben.

i	$\kappa = 0.1348$		$\kappa = 0.1352$		$\kappa = 0.1353$		$\kappa = 0.1354$	
	$\langle a\lambda_i \rangle$	$\langle r_0\lambda_i \rangle$	$\langle a\lambda_i \rangle$	$\langle r_0\lambda_i \rangle$	$\langle a\lambda_i \rangle$	$\langle r_0\lambda_i \rangle$	$\langle a\lambda_i \rangle$	$\langle r_0\lambda_i \rangle$
2	0.014(1)	0.064(3)	0.016(1)	0.077(5)	0.015(1)	0.072(5)	0.018(1)	0.092(7)
4	0.024(1)	0.109(4)	0.026(1)	0.126(7)	0.028(1)	0.139(6)	0.037(2)	0.182(9)
6	0.034(1)	0.154(5)	0.039(2)	0.189(9)	0.045(2)	0.219(8)	0.056(2)	0.278(12)
8	0.044(1)	0.202(5)	0.055(3)	0.266(12)	0.061(2)	0.299(10)	0.079(3)	0.392(14)
10	0.057(1)	0.258(6)	0.070(3)	0.339(13)	0.080(2)	0.390(11)	0.103(3)	0.514(14)
16	0.092(2)	0.418(7)	0.114(3)	0.550(16)	0.129(2)	0.635(12)	0.160(2)	0.794(12)
20	0.115(2)	0.526(8)	0.140(3)	0.677(17)	0.159(2)	0.777(11)	0.185(2)	0.921(11)
30	0.170(2)	0.777(8)	0.194(3)	0.937(17)	0.215(2)	1.053(9)	0.235(2)	1.171(8)
40	0.217(2)	0.992(7)	0.237(3)	1.146(16)	0.258(2)	1.265(8)	0.274(1)	1.364(7)

i	$\kappa = 0.1355$		$\kappa = 0.1358$		$\kappa = 0.1360$	
	$\langle a\lambda_i \rangle$	$\langle r_0\lambda_i \rangle$	$\langle a\lambda_i \rangle$	$\langle r_0\lambda_i \rangle$	$\langle a\lambda_i \rangle$	$\langle r_0\lambda_i \rangle$
2	0.017(1)	0.086(6)	0.048(5)	0.254(24)	0.112(6)	0.607(33)
4	0.037(2)	0.189(9)	0.107(4)	0.564(22)	0.167(2)	0.907(12)
6	0.061(2)	0.307(12)	0.137(3)	0.719(18)	0.187(1)	1.013(7)
8	0.086(3)	0.436(13)	0.158(3)	0.830(15)	0.203(1)	1.099(6)
10	0.113(3)	0.569(13)	0.177(2)	0.930(12)	0.214(1)	1.162(5)
16	0.169(2)	0.855(11)	0.219(2)	1.151(8)	0.244(1)	1.322(4)
20	0.197(2)	0.992(9)	0.239(1)	1.257(7)	0.261(1)	1.412(3)
30	0.245(1)	1.236(6)	0.278(1)	1.466(5)	0.295(1)	1.597(3)
40	0.282(1)	1.423(5)	0.310(1)	1.633(4)	0.322(1)	1.745(3)

Tabelle 10.3: Der Ensemble-Mittelwert des i -ten Eigenwertes, sowohl in Gittereinheiten $a\lambda$, als auch in Einheiten von r_0 für die sieben verschiedenen κ -Werte.

10.6 Das chirale Kondensat und seine Suszeptibilität

Die Banks-Casher-Relation (1.67) verbindet die Dichte $\rho(\lambda)$ in der Nähe des Ursprungs mit dem Wert des chiralen Kondensats Σ . Unterhalb der kritischen Temperatur sollten die Eigenwerte demnach bis an den Ursprung reichen, während oberhalb des Übergangs eine Lücke im Spektrum um den Ursprung auftreten sollte.

Um einen visuellen Eindruck der Verteilung der berechneten 50 Eigenwerte zu geben, zeigen wir in Abbildung 10.10 Scatterplots der niedrigsten 50 Moden λ_i in Abhängigkeit von ihrer Sortierungs-Nummer i für alle sieben analysierten κ -Werte. Wir beschränken uns auf Konfigurationen mit $Q = 0$, so daß i die i -te Nichtnullmode bezeichnet.

Bei den niedrigsten κ -Werten reichen die kleinsten Eigenwerte bis zum Ursprung. Erst bei $\kappa = 0.1358$ fällt ein deutlicher Wandel in der Verteilung der Moden auf. Es fallen wesentlich weniger Moden in den Bereich des Ursprungs. Bei diesem κ -Wert scheint sich bereits eine Lücke im Spektrum um den Ursprung anzudeuten, die bei $\kappa = 0.1360$ klar in Erscheinung tritt.

Wie wir auch bei den Overlap-Simulationen auf dem $16^3 \times 8$ -Gitter festgestellt haben [W3], fallen auch bei dem größten analysierten κ -Wert einige Eigenmoden in die Lücke um den Ursprung. Dieses a priori unerwartete Phänomen wurde auch bei anderen Simulationen mit Overlap-Fermionen bei endlicher Temperatur beobachtet [216]. Dort wurde vermutet, daß es sich hierbei um ein Artefakt der Valenzquark-Approximation handelt. Wir sehen, daß dieser Effekt auch in unserem hybriden Ansatz erscheint. Ob er auch in Simulationen mit dynamischen Overlap-Fermionen auftritt, wird erst die Zukunft zeigen können.

Allerdings sind es bei $\kappa = 0.1360$ ausschließlich Moden die zu dem ersten nichtverschwindenden Paar von Eigenwerten gehören, die in die erwartete Lücke des Spektrums fallen. Dies wird besonders in Abbildung 10.11 deutlich, in der die Verteilung der niedrigsten 10 Paare der Moden für $\kappa = 0.1353 < \kappa_t$ und $\kappa = 0.1360 > \kappa_t$ verglichen wird.

Um die Änderungen im Spektrum in der Umgebung des Phasenübergangs besser quantifizieren zu können, zeigen wir in Abbildung 10.12 die spektrale Dichte für alle betrachteten κ -Werte. Für $\kappa \leq 0.1355$ wird durch die niedrigen Moden eine große spektrale Dichte aufgebaut, die fast bis zum Ursprung

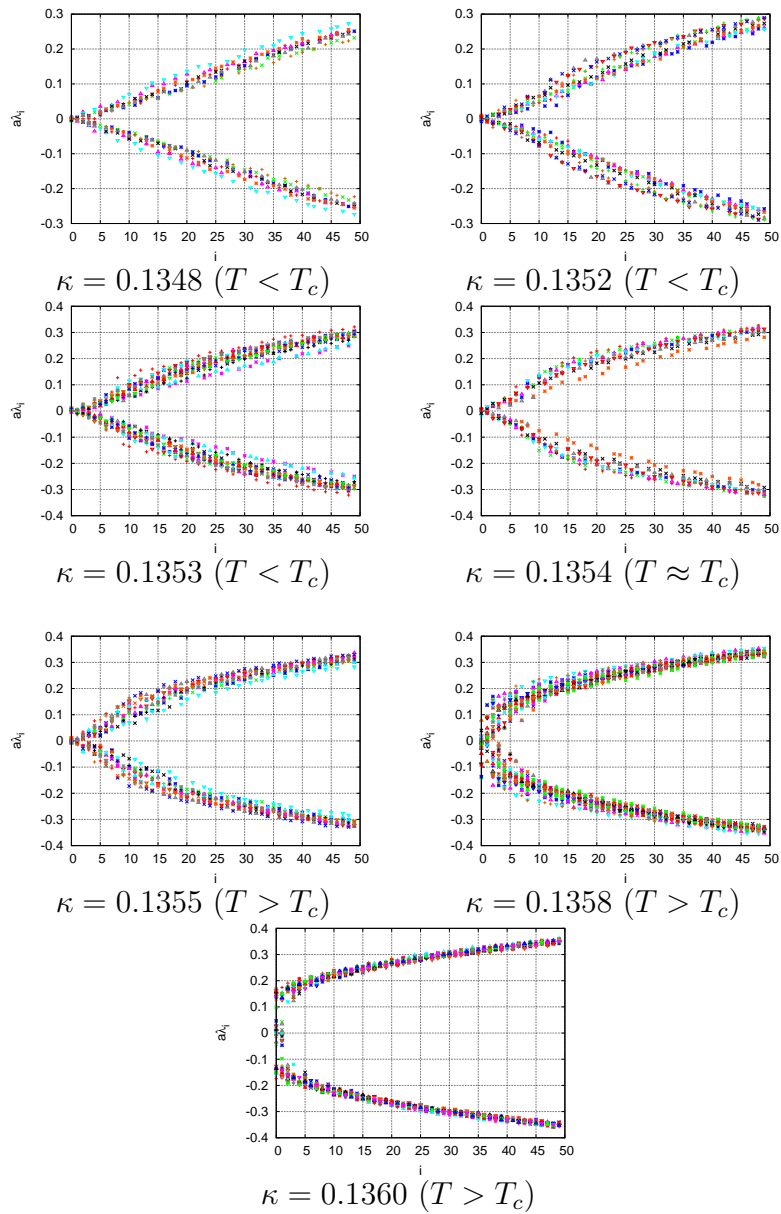


Abbildung 10.10: Scatterplot der absolut sortierten stereographisch projizierten Eigenwerte λ_i^{imp} in Abhängigkeit von i für alle sieben κ -Werte. Es wurden nur Konfigurationen mit $Q = 0$ berücksichtigt.

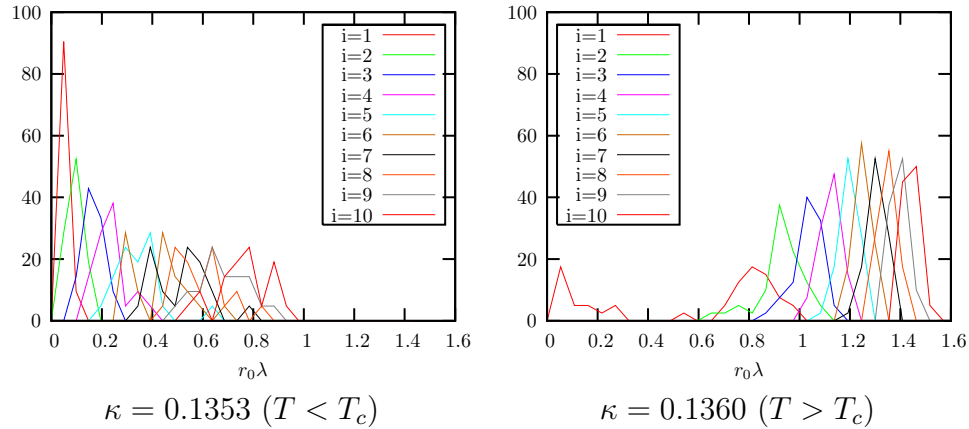


Abbildung 10.11: Vergleich der Verteilung der niedrigsten 10 Paare von Nichtnullmoden λ_i bei $\kappa = 0.1353$ und $\kappa = 0.1360$. Berücksichtigt wurden alle Konfigurationen mit $Q = 0$.

reicht. Bei $\kappa = 0.1358$ wird diese Dichte sehr klein, und verschwindet bei $\kappa = 0.1360$ nahezu komplett. Würde man bei $\kappa = 0.1360$ den Beitrag des niedrigsten Paares von Moden vernachlässigen, würde die Dichte bis zu $r_0\lambda = 0.6$ komplett verschwinden.

Analog zu der bei $T = 0$ betrachteten spektralen Dichte in der Valenzquark-Approximation können auch hier durch Fitten der Dichte mit Formeln der Zufallsmatrixtheorie Werte für das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Temperatur gewonnen werden. In [134] wurde das mikroskopische Spektrum des Dirac-Operators unter Berücksichtigung des Einflusses dynamischer Quarks allgemein für beliebige Anzahl von Flavour-Freiheitsgraden und beliebige Quarkmassen für alle topologischen Sektoren berechnet. Die dort gefundenen Formeln für die spektrale Dichte können auch bei endlicher Temperatur angewendet werden, solange das chirale Kondensat nicht verschwindet.

Abbildung 10.13 zeigt einen Vergleich der von der Zufallsmatrixtheorie prognostizierten mikroskopischen spektralen Dichte für $N_f = 2$ Flavours mit degenerierten Quarkmassen $\Sigma m_q V = 0, 13$ in der Valenzquark-Approximation. Man sieht, daß die Dichte für $N_f = 2$ Flavours im chiralen Limes (grüne Kurve) sich stark von der spektralen Dichte in der Valenzquark-Approximation (rote Kurve) unterscheidet. Sind die Quarkmassen jedoch – so wie im Rahmen dieser Arbeit – noch recht weit vom chiralen Limes entfernt, unterscheidet sich die in der $N_f = 2$ massive Quarks beschreibenden Zufallsmatrixtheorie berechnete Dichte (blaue Kurve) kaum von der in der Valenzquark-Appro-

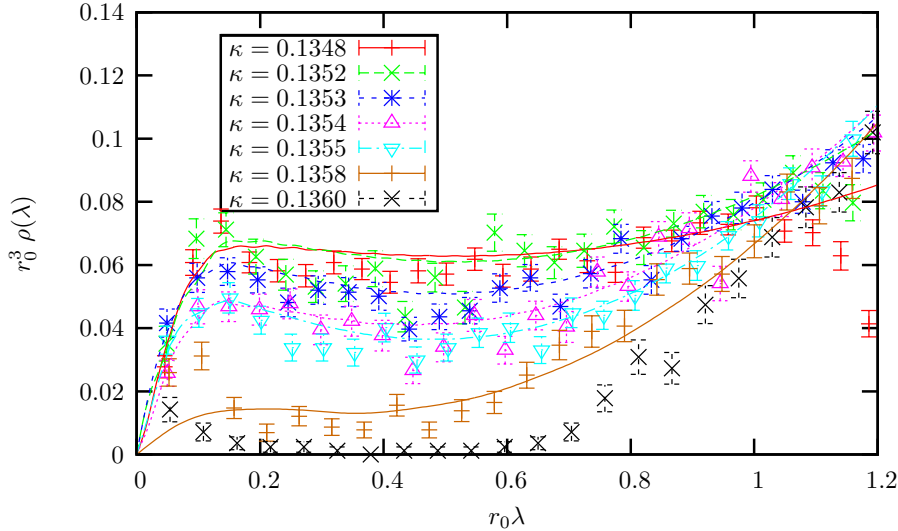


Abbildung 10.12: Die spektrale Dichte $\rho(\lambda)$ zusammen mit Fits basierend auf der Zufallmatrixtheorie in der Valenzquark-Approximation.

ximation bestimmten Kurve (rote Kurve). Da die von uns betrachteten Seequarkmassen noch weit vom chiralen Limes entfernt sind, verwenden wir hier als gute Approximation die Formeln der Zufallmatrixtheorie in der Valenzquark-Approximation zum Fitten der spektralen Dichte.

Analog zum Vorgehen bei $T = 0$ gewichten wir auch hier die mikroskopische spektrale Dichte $\rho_Q(\Sigma_{\text{RMT}}V\lambda)$ mit der gemessenen Ladungsverteilung $w(Q)$ und bestimmen durch Fitten an Gleichung (4.26) für $\kappa \leq 0.1358$ jeweils einen Wert für das chirale Kondensat Σ_{RMT} . Die in Abbildung 10.9 mit eingezeichneten Werte zeigen einen raschen Abfall des chiralen Kondensats in dem analysierten Temperaturintervall, entgegengesetzt zum Anstieg der Polyakov-Loop-Suszeptibilität.

Eine andere Methode zur Berechnung des chiralen Kondensats basiert auf der Propagator-Darstellung des chiralen Kondensats (1.65). Bei Verwendung der Eigenwerte $\pm i\lambda_i$ des verbesserten masselosen Neuberger-Operators gilt analog

$$\langle \bar{\Psi}\Psi \rangle = -\Sigma_q(m_q) = -\text{Tr}(D^{\text{imp}}(m_q)^{-1}) = -\frac{1}{V} \sum_{\lambda_i > 0} \frac{2m_q}{\lambda_i^2 + m_q^2}. \quad (10.23)$$

Ein Trunkieren dieser spektralen Entwicklung entfernt kurzreichweite Fluktuationen des lokalen Kondensats und agiert daher als UV-Filter. Die Nullmoden werden in der spektralen Entwicklung nicht berücksichtigt.

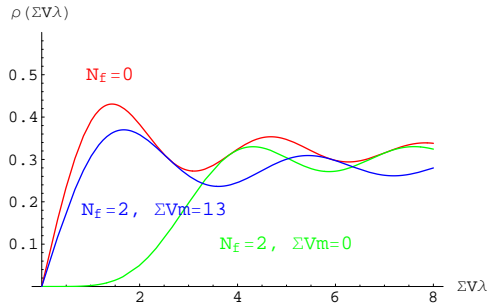


Abbildung 10.13: Vergleich der von der Zufallsmatrixtheorie prognostizierten mikroskopischen spektralen Dichte für $N_f = 2$ Flavours mit verschwindender Masse (grüne Kurve) und reskalierter Masse $\Sigma V m = 13$ (blaue Kurve) mit der Dichte in der Valenzquark-Approximation $N_f = 0$ (rote Kurve).

Da die in Tabelle 10.4 angegebenen interpolierten Pionmassen der betrachteten Ensembles mit zunehmender Temperatur stark abnehmen, kann für die einzelnen Ensembles keine einheitliche Valenzquarkmasse m_q verwendet werden. Um die Masse der Overlap-Valenzquarks und die Masse der Wilson/Clover-Seequarks miteinander abzustimmen, verlangen wir, daß die entsprechenden Pionmassen bei $T = 0$ übereinstimmen.

κ	am_{PS}	am_q
0.1348	0.45	0.045
0.1352	0.37	0.036
0.1353	0.34	0.032
0.1354	0.32	0.027
0.1355	0.30	0.023
0.1358	0.21	0.013
0.1360	0.14	0.006

Tabelle 10.4: Übersicht der interpolierten Werte der Pionmassen sowie der abgestimmten Overlap-Valenzquarkmassen für die sieben verschiedenen Ensembles.

Das Verfahren zur Bestimmung der Valenzquarkmassen wird in Abbildung 10.14 auf einem $16^3 \times 32$ -Gitter der QCDSF-Kollaboration mit $\beta = 5.20$ und $\kappa = 0.1355$ verdeutlicht. Die verwendeten dynamischen Konfigurationen wurden mit der gleichen Wilson/Clover-Wirkung wie im Falle endlicher Temperatur generiert. Durch Invertierung des Wilson/Clover-Dirac-Operators wurde von der QCDSF-Kollaboration bei diesen Parametern eine Pionmasse von $am_\pi = 0.291(2)$ bestimmt. Auf den gleichen Konfigurationen werden die nied-

rigsten 50 Overlap-Eigenmoden berechnet und Pion-Korrelationsfunktionen für unterschiedliche Valenzquarkmassen $am_q = 0.01, \dots, 0.06$ bestimmt. Abbildung 10.15 zeigt analog zu Abbildung 9.2 (a) die Abhängigkeit der Korrelationsfunktion des Pions von der Anzahl der in der spektralen Entwicklung verwendeten Moden. Man sieht, daß für große Zeiten auch im Falle dynamischer Konfigurationen ein Plateau entsteht, so daß $\mathcal{O}(50)$ Moden ausreichend sind, um die Pionmassen zu approximieren. Es wird nun die Valenzquarkmasse ausgewählt, bei der die effektive Pionmasse $am_{\text{eff}}(t)$ für große Zeiten $t \approx 15$ am besten mit dem QCDSF-Wert am_π übereinstimmt. Unsere Testsimulationen haben gezeigt, daß die so bestimmte Valenzquarkmasse gut mit der unter Verwendung von Wilson/Clover-Valenzquarks berechneten PCAC-Quarkmasse übereinstimmt. Die Daten der PCAC-Massen wurden daher bei der Interpolation der in Tabelle 10.4 gezeigten und zur Berechnung des chiralen Kondensats verwendeten Valenzquarkmassen berücksichtigt.

Die unter Verwendung von 50 Overlap-Eigenmoden auf den einzelnen Ensembles unter Verwendung dieser Valenzquarkmassen berechneten Werte des chiralen Kondensats $\Sigma_q(m_q)$ sind in Abbildung 10.9 mit eingezeichnet. Sie stimmen ohne weitere Reskalierung recht gut mit den durch das Fitten der spektralen Dichte erhaltenen Werten Σ_{RMT} überein.

Basierend auf dem chiralen Kondensat $\Sigma_q(m_q)$ wird der unverbundene Term der chiralen Suszeptibilität [205]

$$\chi_q(m_q) = \langle (\text{Tr}(D^{\text{imp}}(m_q)^{-1}))^2 \rangle - \langle \text{Tr}(D^{\text{imp}}(m_q)^{-1}) \rangle^2 \quad (10.24)$$

bestimmt. Die in Abbildung 10.9 mit eingezeichnete Suszeptibilität zeigt einen markanten Peak bei $\kappa = 0.1352$. Die Position des Peaks der chiralen Suszeptibilität ist stabil unter Variation der Valenzquarkmassen.

Der Wert, bei dem die chirale Suszeptibilität ihr Maximum erreicht ist deutlich kleiner als der Wert $\kappa_t = 0.13542(6)$, bei dem die Polyakov-Loop-Suszeptibilität maximal ist. Diese Beobachtung ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen in [196, 205] und kann als Indiz gedeutet werden, daß der Phasenübergang ein Crossover ist und gluonische und fermionische Signale zur Lokalisierung des kritischen κ -Werts nicht übereinstimmen müssen.

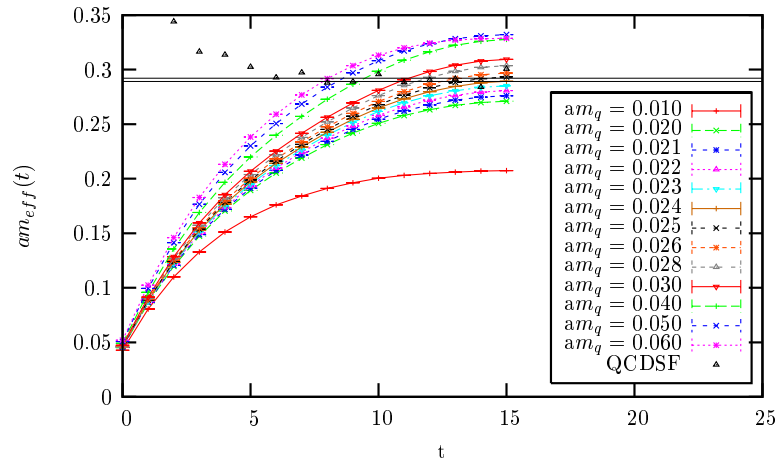


Abbildung 10.14: Abstimmung der Valenzquarkmasse und der Seequarkmasse auf einem $(T = 0)$ $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 5.20$ und $\kappa = 0.1355$. Die effektive pseudoskalare Masse wird für 13 verschiedene im massiven Overlap-Operator eingesetzte Valenzquarkmassen $0.01 \leq m_q \leq 0.06$ gezeigt. Verwendet wird dabei die auf 50 Moden basierende spektrale Entwicklung des Pion-Korrelators. Die beiden schwarzen horizontalen Linien kennzeichnen das Fehlerintervall der von der QCDSF-Kollaboration bei diesen Parameterwerten bestimmten pseudoskalaren Masse $am_{PS} = 0.291(2)$.

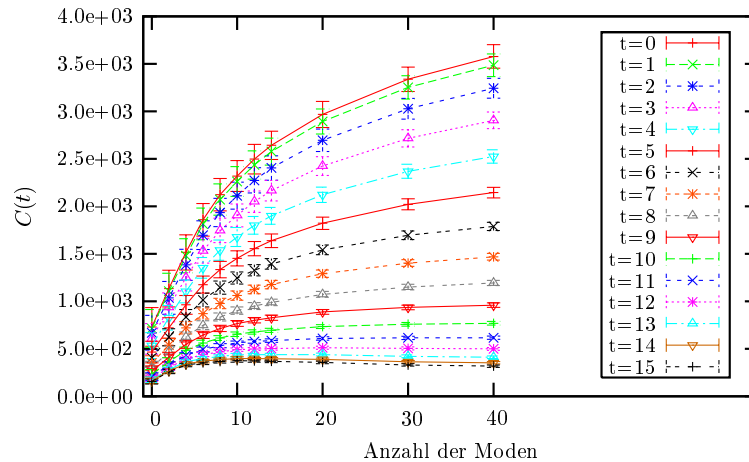


Abbildung 10.15: Abhängigkeit des Pion-Korrelators von der Anzahl der in der spektralen Entwicklung verwendeten Nichtnullmoden für unterschiedliche Zeitstufen $t = 0, \dots, 15$ auf einem $(T = 0)$ $16^3 \times 32$ -Gitter bei $\beta = 5.20$ und $\kappa = 0.1355$. Der Wert bei Null ist der akkumulierte Beitrag der Nullmoden.

10.7 Lokalisierungseigenschaften der Eigenmoden

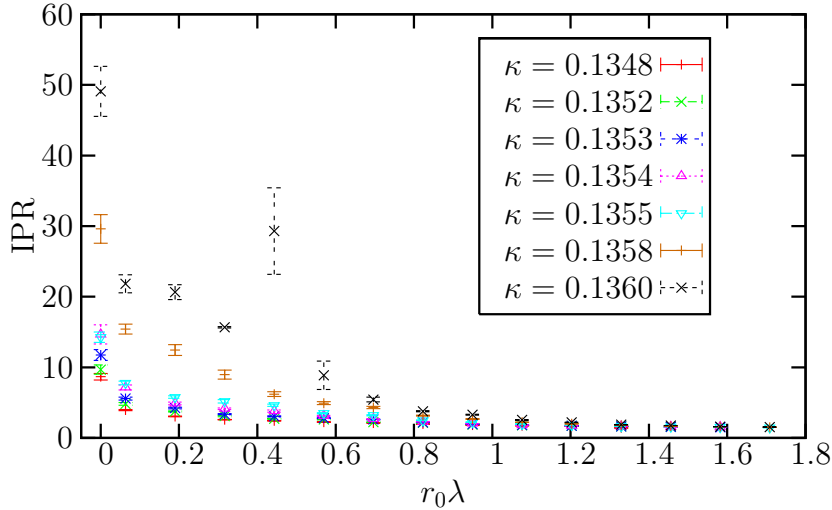


Abbildung 10.16: Die mittleren IPRs der Nullmoden und der Nichtnullmoden, für letztere in $r_0\lambda$ -Bins der Breite 0.125.

Um die Veränderungen der Lokalisierungseigenschaften der niedrig liegenden Moden im Bereich des Phasenübergangs zu studieren, zeigen wir in Abbildung 10.16 analog zu Abbildung 5.3 die inversen Partizipationsverhältnisse sowohl der Nullmoden als auch der kleinen Nichtnullmoden, für letztere in $r_0\lambda$ -Bins der Breite 0.125.

Für $\kappa \leq 0.1355$ sind die Lokalisierungseigenschaften vergleichbar mit denen bei $T = 0$. Die höheren Moden sind delokalisiert, die niedrig liegenden Nichtnullmoden haben leicht erhöhte IPRs, während die Nullmoden stark lokalisiert sind. Je größer κ , desto stärker sind die Nullmoden und niedrig liegenden Nichtnullmoden lokalisiert. Der chirale Phasenübergang scheint durch die stärker werdende Lokalisierung der niedrigen Moden vorbereitet zu werden. Die Lokalisierungseigenschaften bei $\kappa = 0.1358$ und $\kappa = 0.1360$ unterscheiden sich deutlich von den restlichen κ -Werten. Während die höheren Moden vergleichbar delokalisiert sind, sind für $r_0\lambda < 0.6$ die IPR's teils um einen Faktor 5 größer. Dies sind jedoch gerade die IPRs der wenigen ersten 2–4 Nichtnullmoden, die in die eigentlich zu erwartende Lücke im Spektrum fallen. Die Nullmoden sind mit einem IPR von 30 bzw. 49 bei $\kappa = 0.1358$ bzw. $\kappa = 0.1360$ extrem lokalisiert.

10.8 Chirale Eigenschaften der Eigenmoden

Um den Wandel der chiralen Eigenschaften der Eigenmoden in der Umgebung des Übergangs zu untersuchen, zeigen wir in Abbildung 10.17 und 10.18 analog zu Kapitel 6 normierte Histogramme der lokalen Chiralitätsvariable $X(x)$. Berücksichtigt werden stets 1% der Gitterpunkte mit größter skalarer Dichte $p(x)$. Die linken Abbildungen präsentieren Histogramme für die niedrigsten 10 Paare komplex konjugierter Moden. Diese weisen für kleine κ -Werte eine stark ausgeprägte Doppel-Peak-Struktur wie bei $T = 0$ auf. Mit zunehmender Temperatur wird das Signal der lokalen Chiralität allerdings schwächer, um bei $\kappa = 0.1360$ nahezu komplett zu verschwinden. Lediglich das erste Paar von Nichtnullmoden zeigt noch ein stärkeres Maß an lokaler Chiralität. Die rechten Abbildungen zeigen die Verteilung von $X(x)$ gemittelt über $r_0\lambda$ -Bins der Breite 0.125. Für die beiden größten κ -Werte $\kappa = 0.1358$ und $\kappa = 0.1360$ wird deutlich, daß das erhöhte Maß an lokaler Chiralität des ersten Paares von Nichtnullmoden lediglich von den wenigen Moden stammt, die in die eigentlich zu erwartende Lücke im Spektrum fallen. Außerhalb der Lücke im Spektrum, d.h. für $r_0\lambda > 0.6$, verschwindet in der Hochtemperaturphase der QCD das Signal erhöhter Chiralität nahezu komplett.

10.9 Topologische Eigenschaften in der Umgebung des Übergangs

Die topologische Ladung der dynamischen Konfigurationen wurde auf fermionischem Wege mittels des Index-Theorems bestimmt. Die Verteilung der topologischen Ladung ist in Abbildung 10.19 für die einzelnen Ensembles gezeigt. Trotz der aufgrund der geringen Statistik sehr starken Abweichungen von der Gauß-Form erkennt man klar, daß die Verteilungen der Ladung beim Übergang zu höheren Temperaturen deutlich schmaler werden. Während bei kleinen κ -Werten die Ladungen im Intervall $[-9,9]$ liegen, treten bei dem größten betrachteten Wert $\kappa = 0.1360$ 87% der Werte im Intervall $[-1,1]$ auf. Dies demonstriert, daß höhere topologische Ladungen beim Übergang zu höheren Temperaturen stark unterdrückt werden. Somit weist auch die in Abbildung 10.20 gezeigte topologische Suszeptibilität in dem betrachteten Temperaturintervall von $[0.91 T_c, 1.09 T_c]$ einen raschen Abfall auf.

Die Unterdrückung höherer topologischer Ladungen spiegelt sich auch in dem in Abbildung 10.21 für alle κ -Werte gezeigten Korrelatoren $r_0^8 C_{qq}(r)$ der

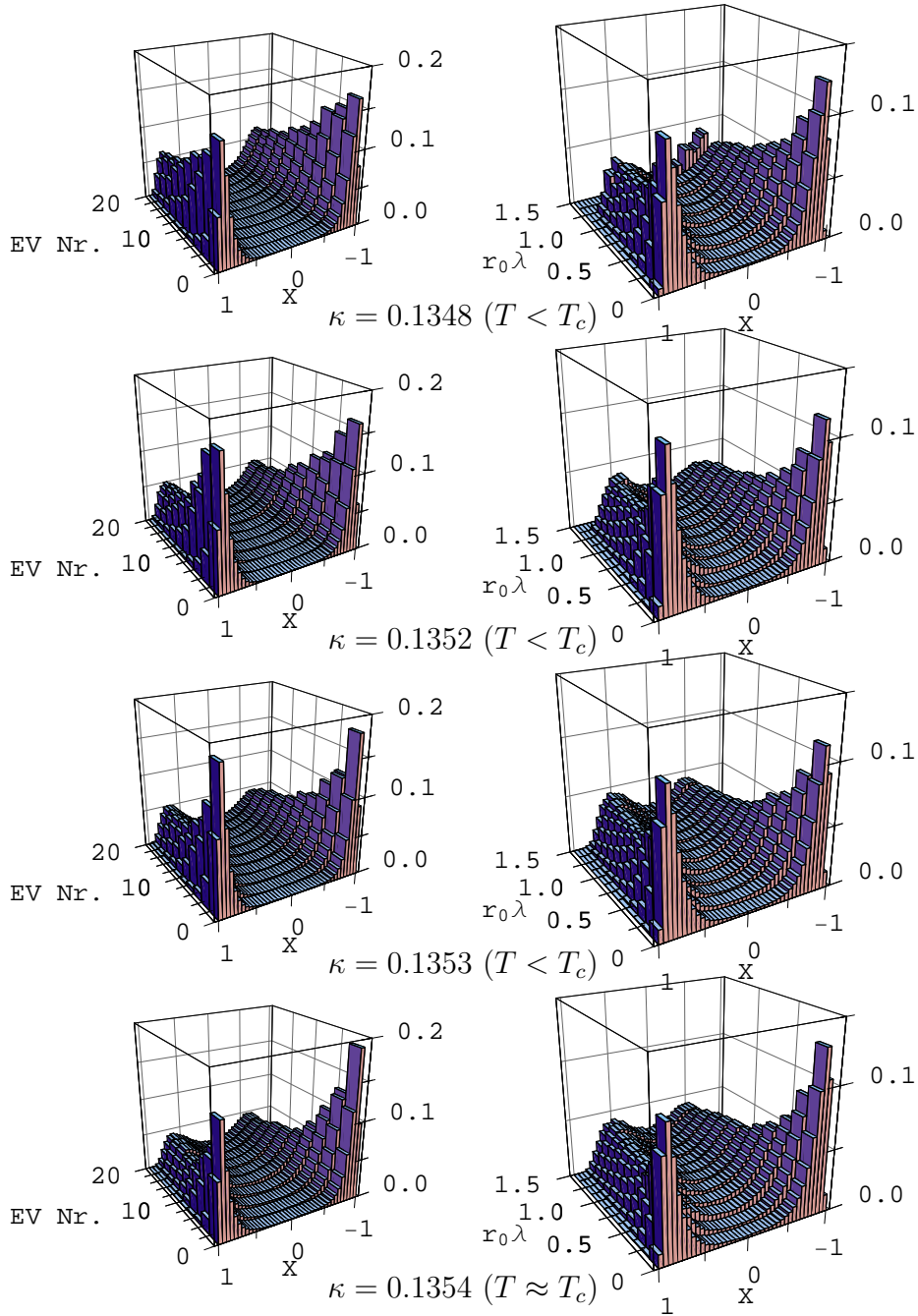


Abbildung 10.17: Normierte Histogramme der lokalen Chiralität $X(x)$ gemittelt über alle Konfigurationen für die Ensembles mit $\kappa = 0.1348, 0.1352, 0.1353$ und $0.1354 (T \leq T_c)$. Die linken Bilder zeigen die Histogramme für die niedrigsten 10 Paare komplex konjugierter Moden, die rechten für alle berechneten Moden, gemittelt über $r_0\lambda$ -Bins der Breite 0.125. Berücksichtigt werden 1% der Gitterpunkte mit größter skalarer Dichte $p(x)$.

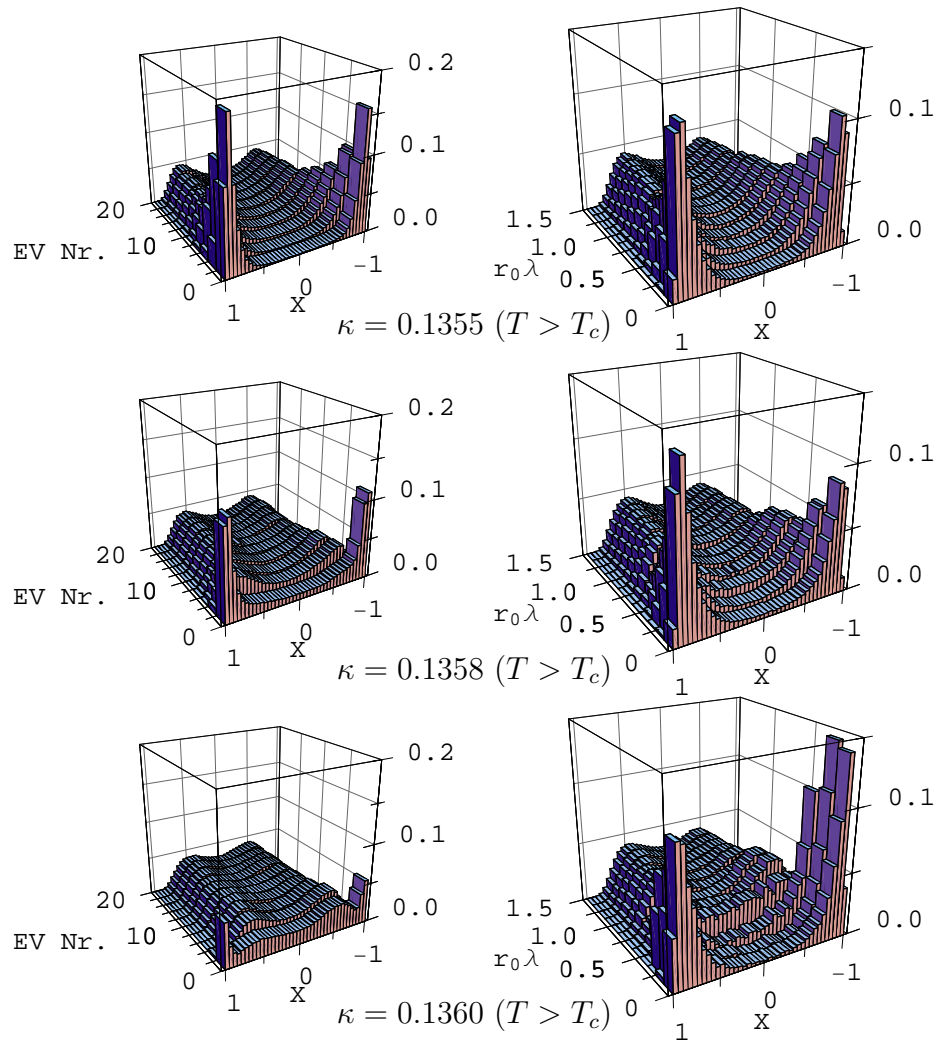


Abbildung 10.18: Normierte Histogramme analog zu Abbildung 10.17 allerdings für $\kappa = 0.1355, 0.1358$ und 0.1360 ($T > T_c$).

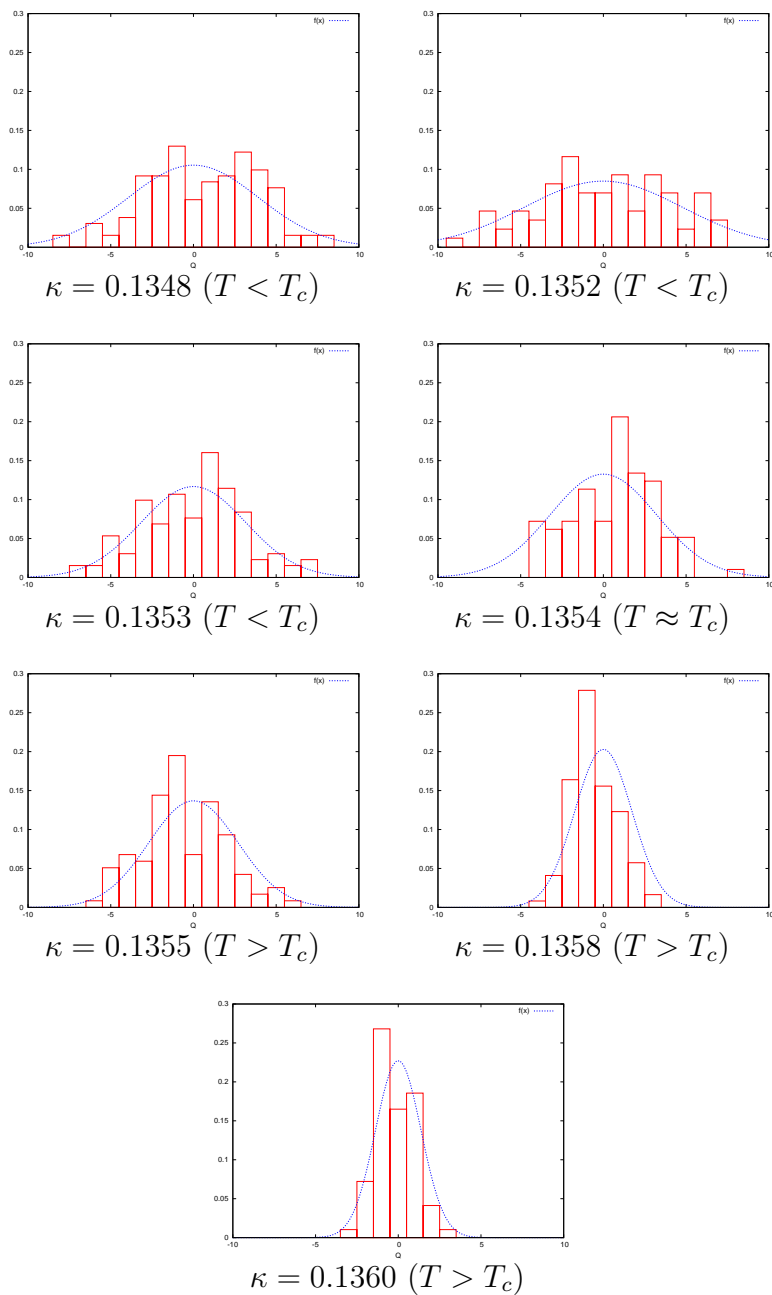


Abbildung 10.19: Normierte Verteilungen der aus dem Index des Overlap-Operators bestimmten topologischen Ladung Q zusammen mit Gauß'schen Fits für alle betrachteten Ensembles.

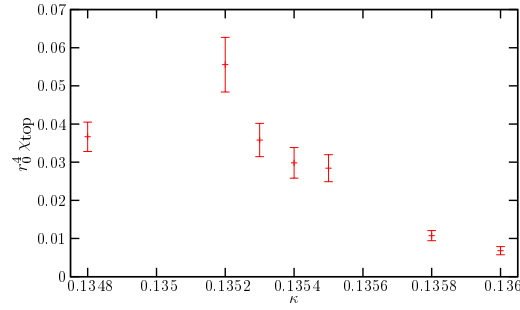


Abbildung 10.20: Die topologische Suszeptibilität $r_0^4 \chi_{\text{top}}$ als Funktion von κ .

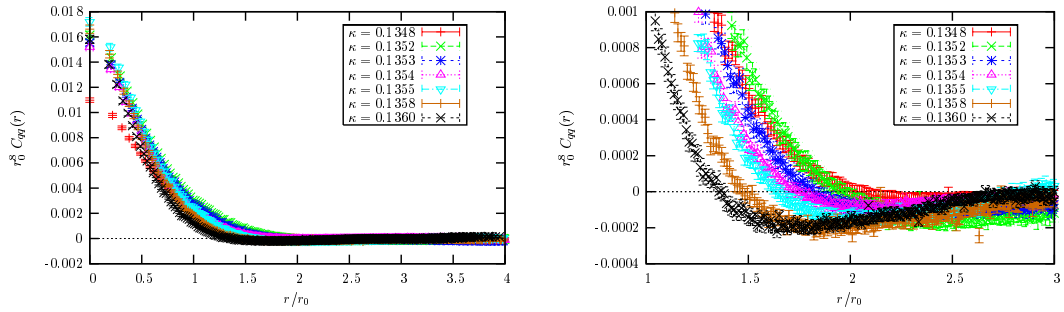


Abbildung 10.21: Die Korrelationsfunktion $r_0^8 C_{qq}(r)$ der trunkierten topologischen Ladungsdichte basierend auf den 50 niedrigsten Eigenmoden des Overlap-Operators als Funktion von r/r_0 . Das rechte Bild vergrößert den Bereich, in dem die Korrelationsfunktion für genügend hohe κ -Werte deutlich negativ wird.

trunkierten topologischen Ladungsdichte wider. Zur Berechnung der trunkierten Dichte nach Gleichung (7.22) wurden alle 50 Moden verwendet. Das auf der rechten Seite gezeigte Bild vergrößert den Bereich um die x-Achse und verdeutlicht, daß die Korrelationsfunktion mit zunehmender Temperatur negativer wird. Bei der kleinsten betrachteten Temperatur mit $\kappa = 0.1348$ wird der Korrelator bei $r/r_0 = 2.05$ erstmals negativ, die Fehlerbalken berühren aber für größere Abstände stets die x-Achse. Bei dem nächstgrößeren $\kappa = 0.1352$ ist der positive Kernbereich nur mehr bis $r/r_0 = 1.96$ ausgedehnt und die Korrelationsfunktion zeigt einen stark ausgeprägten konvex gekrümmten negativen Schwanz. Beim Übergang zu höheren κ -Werten nimmt die Krümmung und die Negativität der Korrelationsfunktion deutlich zu, während die Ausdehnung des positiven Kerns abnimmt. Vor allem das Verhalten bei den größten beiden κ -Werten unterscheidet sich deutlich von den restlichen. Bei $\kappa = 0.1360$ ist die Ausdehnung des positiven Kerns auf $r/r_0 = 1.36$ geschrumpft. Wie aus der linken Abbildung ersichtlich, variiert die (Auto-)Korrelation bei $r = 0$ für $\kappa \geq 0.1352$ nur geringfügig, so daß die topologische Suszeptibilität, die nach (7.24) als Integral über den Ladungskorrelator geschrieben werden kann, mit zunehmender Temperatur abnimmt.

Die stärker werdende Negativität des Korrelators reflektiert die zunehmende Paarung entgegengesetzt geladener Cluster mit ansteigender Temperatur. Diese Paarung weist gewisse Ähnlichkeiten mit semiklassischen Modellen auf, die die Restauration der chiralen Symmetrie durch Bildung von Instanton/Antiinstanton-Molekülen modellieren [217].

Der Wandel der topologischen Struktur bei höheren Temperaturen wird auch in der Clusteranalyse der trunkierten topologischen Dichte deutlich. Abbildung 10.22 zeigt einige Resultate der analog zu Abschnitt 7.3.2 durchgeführten Clusteranalyse.

Da das Gittervolumen des hier analysierten $24^3 \times 10$ -Gitters nur um 1.05% größer als das Volumen des bei $T = 0$ betrachteten $16^3 \times 32$ -Gitters ist, sind die hier gezeigten Ergebnisse sehr ähnlich. Der hier untersuchte Fall basierend auf 50 Moden korrespondiert mit einem Cutoff λ_{cut} , der zwischen dem bei $T = 0$ auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter betrachteten $\lambda_{\text{cut}} = 200$ MeV (mit nach Tabelle 7.2 ca. 36 Moden) und $\lambda_{\text{cut}} = 634$ MeV (mit ca. 92 Moden) liegt.

- **Clusterperkolation** (Abb. 10.22 (a))

Die Perkolation setzt bei $\kappa = 0.1360$ bzw. $\kappa = 0.1358$ bereits bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.20$ bzw. 0.15 ein, während für kleinere Temperaturen die

Perkolation mit sehr geringer Wahrscheinlichkeit erst bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$ beginnt. $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.05$ liegt für alle betrachteten Ensembles im perkolierenden Regime, allerdings ist die Wahrscheinlichkeit für $\kappa = 0.1360$ bzw. $\kappa = 0.1358$ um einen Faktor 22 bzw. 13 größer als bei $\kappa = 0.1348$.

- **Anzahl der Cluster** (Abb. 10.22 (b))
Die maximale Anzahl der Cluster wird wie auf dem $16^3 \times 32$ -Gitter unabhängig von κ bei $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} = 0.1$ etwa mit dem Einsetzen der Perkolation erreicht. Während die maximale Anzahl für $\kappa \leq 0.1355$ unabhängig von κ ca. 31 beträgt, ist sie bei $\kappa = 0.1360$ bzw. $\kappa = 0.1358$ mit 39 bzw. 35 Clustern deutlich größer. Für $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} \leq 0.1$ steigt die Zahl der Cluster mit größer werdender Temperatur, während sich diese Tendenz für größere $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ umdreht. Allein die Zahl der Cluster bei $\kappa = 0.1360$ bleibt im Intervall $0.05 \leq q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} \leq 0.45$ stets größer als die Anzahl bei kleineren κ -Werten.
- **Abstand der beiden größten Cluster $d(C^{\text{max1}}, C^{\text{max2)})$ in Einheiten von a/r_0** (Abb. 10.22 (c))
Der Abstand in Gittereinheiten ist vergleichbar mit den Ergebnissen bei $T = 0$. Um jedoch den Wandel in Abhängigkeit von der Temperatur diskutieren zu können, zeigen wir hier den Abstand in Einheiten von a/r_0 . Man erkennt, daß mit steigender Temperatur der Abstand der beiden größten entgegengesetzt geladenen Cluster deutlich kleiner wird. Dies erklärt die zunehmende Negativität des Ladungskorrelators mit ansteigender Temperatur.
- **Packungsdichte der Cluster $V_{\text{cluster}}/V_{\text{lat}}$** (Abb. 10.22 (d))
Die Packungsdichte bei $\kappa = 0.1360$ und $\kappa = 0.1358$ ist deutlich größer als bei kleineren Temperaturen. Auch dies ist notwendig, um den Korrelator negativ werden zu lassen.
- **Fraktionales Clustervolumen der beiden größten Cluster C^{max1} und C^{max2}** (Abb. 10.22 (e),(f))
Das fraktionale Clustervolumen der beiden größten Cluster ist vergleichbar mit den Ergebnissen bei $T = 0$. Im nicht perkolierenden Bereich steigt das Clustervolumen deutlich mit zunehmender Temperatur an. Vor allem in der Umgebung von $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}} \approx 0.15$ unterscheidet sich das Verhalten bei den beiden größten κ -Werten deutlich von den restlichen Ensembles.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die größere Anzahl von dichter gepackten Clustern, sowie das Zusammenrücken der beiden größten Cluster Ausdruck einer Paarung entgegengesetzt geladener topologischer Objekte in der Hochtemperatur-Phase ist, die auch in der Negativität des Ladungskorrelators reflektiert wird. Der kontinuierliche Wandel der Clustereigenschaften in dem betrachteten Temperaturintervall deutet an, daß es sich bei dem Übergang um einen Crossover handelt.

Die hier nicht gezeigten Ergebnisse der Clusteranalyse der vollen topologischen Dichte [W3], die aufgrund der enormen numerischen Anforderungen lediglich auf dem $16^3 \times 8$ -Gitter bei endlicher Temperatur durchgeführt wurde, sind vergleichbar mit den Ergebnissen auf dem $12^3 \times 24$ -Gitter bei $T = 0$ und bestätigen das Bild zweier dicht verschlungener globaler Vorzeichen-kohärenter Strukturen auch bei endlicher Temperatur.

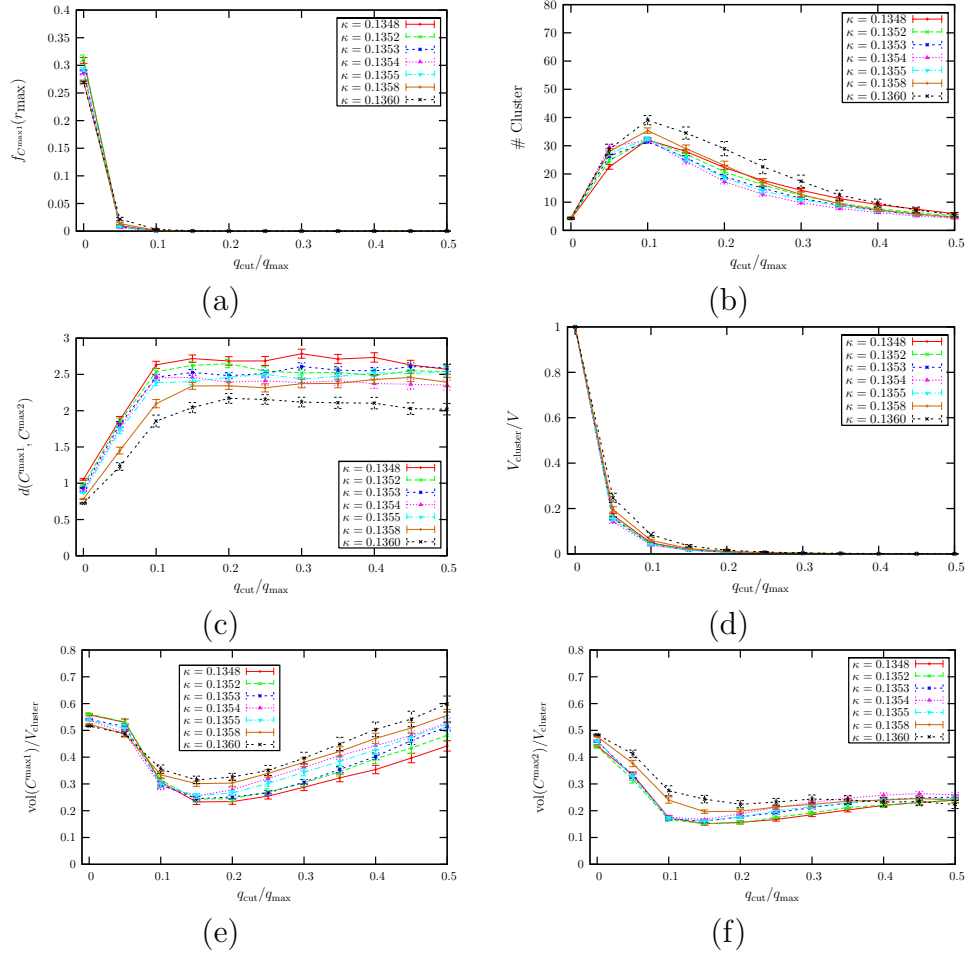


Abbildung 10.22: Ergebnisse der Clusteranalyse der vollen topologischen Dichte. Gezeigt wird die $q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$ -Abhängigkeit für folgende gemittelte Größen: (a) Clusterperkolations, (b) die Anzahl der Cluster, (c) der Abstand der beiden größten Cluster in Einheiten von a/r_0 , (d) die Packungsdichte der Cluster, sowie das fraktionale Clustervolumen des größten (e) bzw. des zweitgrößten Clusters (f).

10.10 Die lokale Selbstdualität in der Umgebung des Übergangs

Der Wandel der lokalen Chiralität der niedrig liegenden Moden und der topologischen Struktur beim Übergang zu höheren Temperaturen spiegelt sich auch in der lokalen Selbstdualität des aus den niedrigsten Moden rekonstruierten Feldstärketensors wider. Analog zu Abschnitt 8.2 werden in Abbildung 10.23 normierte Histogramme der lokalen Selbstdualität $R(x)$ in Abhängigkeit von der Anzahl der in der spektralen Entwicklung des Feldstärketensors verwendeten Moden gezeigt. Hierbei wurden alle Gitterpunkte berücksichtigt.

Man erkennt, daß die Spitzen der Verteilung bei $|R(x)| \lesssim 1$ mit zunehmender Temperatur deutlich kleiner werden. Bei $\kappa = 0.1360$ erreicht nur noch die Verteilung, die lediglich das niedrigste Paar von Nichtnullmoden berücksichtigt, zwei Spitzen, die größer als 20% sind. Dies bedeutet, daß in der Hochtemperatur-Phase die Kohärenz der Moden, die notwendig ist, um in der spektralen Darstellung des Feldstärketensors ein Signal erhöhter Selbstdualität zu erzeugen, zerstört wird.

Um auch hier einen visuellen Eindruck der Zusammengehörigkeit von Gebieten hoher Selbstdualität zu geben, zeigen wir in Abbildung 10.24 Isoflächen der lokalen Selbstdualität $R(x)$ mit $R_{\text{cut}} = 0.999$ für eine jeweils typische Konfiguration für sechs κ -Werte. In der Entwicklung des Feldstärketensors werden hierbei 16 Nichtnullmoden berücksichtigt. Während man bei kleinen Temperaturen größere zusammenhängende Bereiche starker Selbstdualität erkennt, treten bei hoher Temperatur in stark fragmentierter Form lediglich vereinzelt unregelmäßig geformte kleine Bereiche erhöhter Selbstdualität auf. Der Großteil des Gitters ist von Feldern gefüllt, die sehr starke Abweichungen von exakter Selbstdualität zeigen.

Analog zu Abschnitt 8.3 wurde auch hier eine Clusteranalyse in Abhängigkeit von $0.94 \leq R_{\text{cut}} \leq 1$ durchgeführt, wobei 16 Moden in der Entwicklung des Feldstärketensors verwendet werden. Die über alle Unterensembles mit $Q = 0$ gemittelten Ergebnisse der Clusteranalyse zeigt Abbildung 10.25.

- **Clusterperkolation** (Abb. 10.25 (a))

Die Perkolation setzt für niedrige Temperaturen mit $\kappa \leq 0.1355$ bereits bei $R_{\text{cut}} \approx 0.998$ mit rasch wachsender Wahrscheinlichkeit ein. Für $\kappa = 0.1358$ bzw. $\kappa = 0.1360$ perkoliert das größte Cluster mit sehr

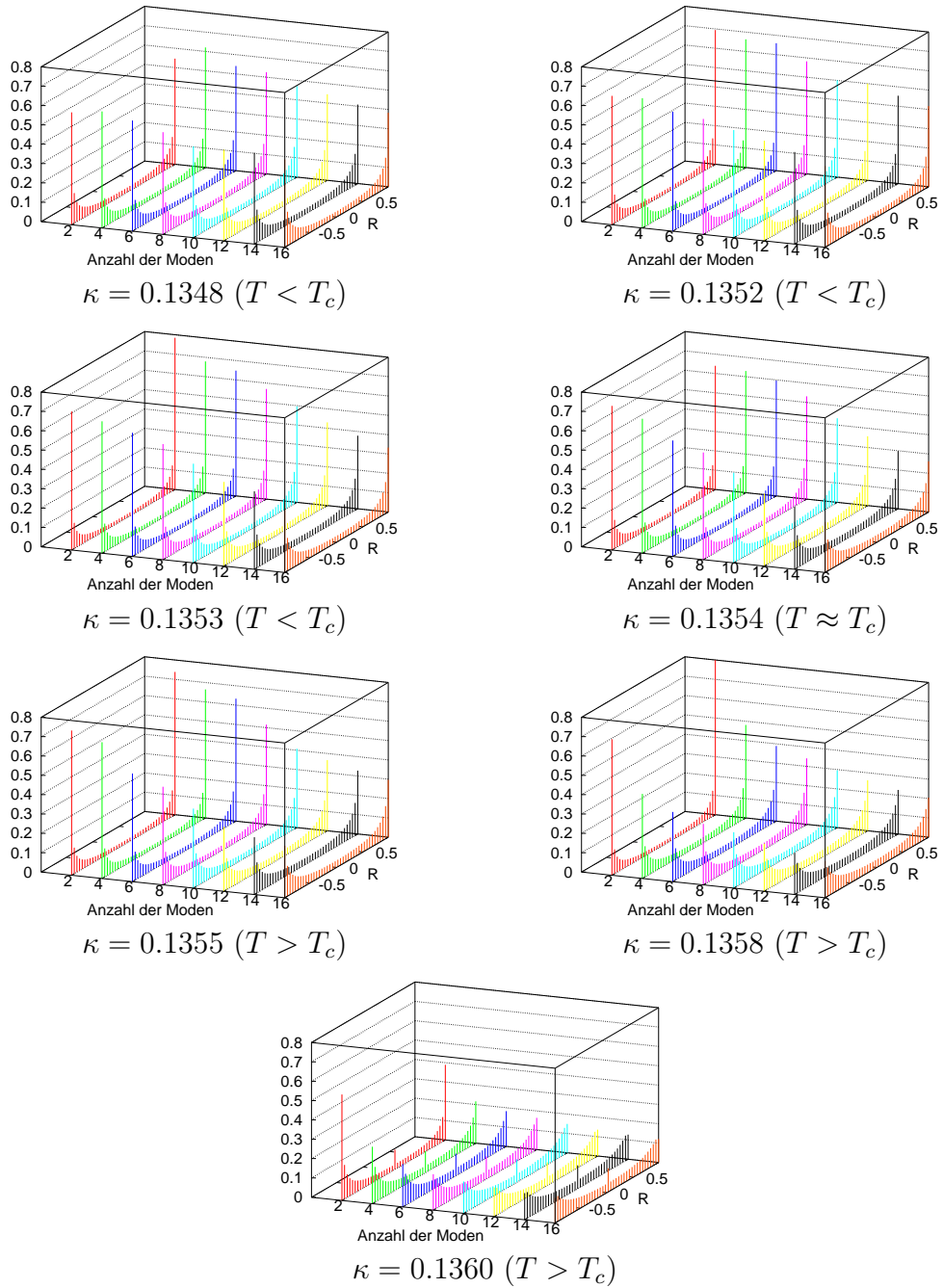


Abbildung 10.23: Normierte Histogramme der lokalen Selbstdualität $R(x)$ des gluonischen Feldstärketensors, gemittelt über alle Konfigurationen mit $Q = 0$ in Abhängigkeit von der in der spektralen Entwicklung des Feldstärketensors verwendeten Anzahl von Nichtnullmoden. Berücksichtigt werden alle Gitterpunkte.

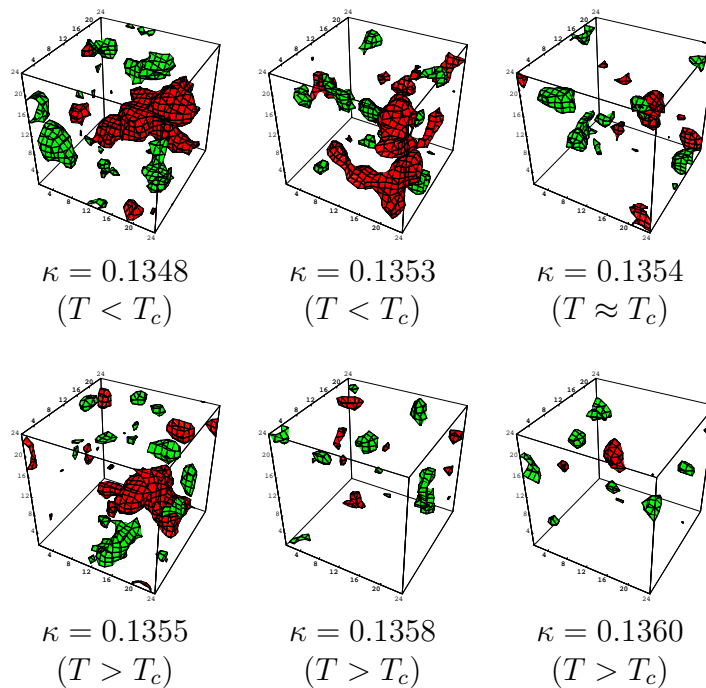


Abbildung 10.24: Isoflächen der lokalen Selbstdualität $R(x)$ mit $R_{\text{cut}} = 0.999$ für eine jeweils typische Konfiguration auf einer einzelnen ausgewählten Zeitschicht für sechs κ -Werte. Die Farbgebung kodiert hierbei das Vorzeichen von $R(x)$. In der Entwicklung des Feldstärketensors werden hierbei 16 Nichtnullmoden berücksichtigt.

kleiner Wahrscheinlichkeit erstmals bei $R_{\text{cut}} = 0.99$ bzw. 0.98 . Die Wahrscheinlichkeit steigt für $R_{\text{cut}} \leq 0.97$ nur sehr leicht an.

- **Anzahl der Cluster** (Abb. 10.25 (b))
 Für $\kappa \leq 0.1353$ wächst die Anzahl der Cluster mit ansteigendem R_{cut} leicht an und fällt auch bei dem höchsten betrachteten $R_{\text{cut}} = 0.999$ nicht signifikant ab. Es existieren demnach bei niedriger Temperatur Bereiche sehr hoher Selbstdualität die innerhalb größerer R -Cluster mit stärkerer Abweichung von exakter Selbstdualität enthalten sind. Das Verhalten bei höheren Temperaturen mit ansteigendem R_{cut} ist deutlich anders. Zwar ist die Anzahl der Cluster bei kleinen R_{cut} für höhere Temperaturen größer, sie fällt jedoch bei den beiden größten κ -Werten beginnend bei $R_{\text{cut}} \approx 0.985$ sehr rasch auf Null ab. Cluster mit hoher Selbstdualität werden in der Hochtemperatur-Phase stark unterdrückt. Die bei geringerem Cutoff auftretenden Cluster mit starker Abweichung von exakter Selbstdualität enthalten für $\kappa \geq 0.1358$ keinen stark (anti-)selbstdualen Kern.
- **Abstand der beiden größten Cluster $d(C^{\text{max1}}, C^{\text{max2}})$ in Einheiten von a/r_0** (Abb. 10.25 (c))
 Der Abstand der beiden größten Cluster in Einheiten von a/r_0 wächst im Bereich $0.95 \leq R_{\text{cut}} \leq 0.99$ mit steigender Temperatur an. Für höhere R_{cut} -Werte ist der Abstand im Falle $\kappa = 0.1360$ jedoch deutlich geringer als für kleinere κ -Werte. Dies kann als eine Tendenz zur Paarung kleiner fragmentierter selbstdualer Bereiche in der Hochtemperatur-Phase interpretiert werden.
- **Mittleres Volumen der Cluster und fraktionales Volumen der beiden größten Cluster C^{max1} und C^{max2}** (Abb. 10.25 (d),(e),(f))
 Mit steigender Temperatur wird das fraktionale Volumen der beiden größten Cluster und auch das mittlere Clustervolumen deutlich kleiner. Bei $\kappa = 0.1360$ füllt das größte Cluster mit $|R(x)| \geq 0.99$ lediglich 0.3% des Volumens aus, während bei $\kappa = 0.1348$ 6% des Gittervolumens von dem größten Cluster eingenommen wird.

Zusammenhängende ausgedehnte Bereiche hoher Selbstdualität werden in der Hochtemperatur-Phase der QCD somit stark unterdrückt. Die Kohärenz der $\mathcal{O}(20)$ Nichtnullmoden, die bei niedrigen Temperaturen zu starken Signalen lokaler Selbstdualität führt, geht bei hohen Temperaturen verloren.

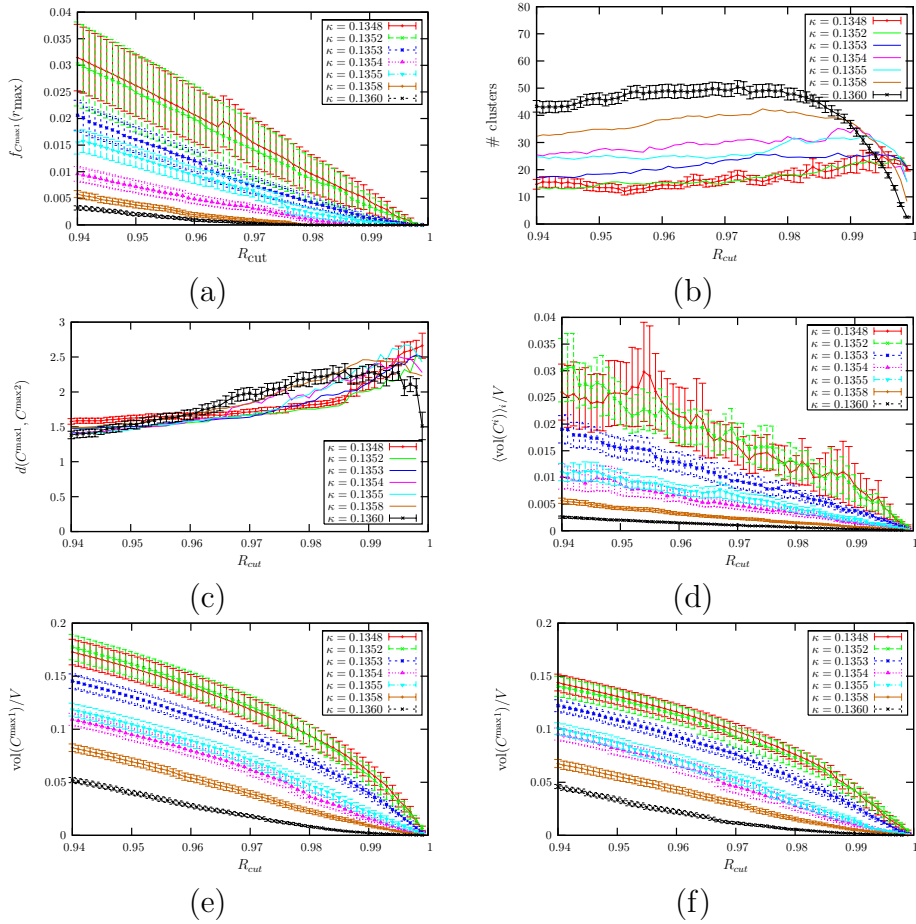


Abbildung 10.25: Ergebnisse der Clusteranalyse der lokalen Selbstdualität $R(x)$. Gezeigt wird die R_{cut} -Abhängigkeit für folgende gemittelte Größen: (a) Clusterperkolations, (b) die Anzahl der Cluster, (c) der Abstand der beiden größten Cluster in Einheiten von a/r_0 , (d) das mittlere Volumen der Cluster sowie das fraktionale Clustervolumen des größten (e) bzw. des zweitgrößten Clusters (f). Die Daten wurden jeweils über die $Q = 0$ Unterensembles gemittelt. Zur besseren Erkennbarkeit werden die Fehler in (b) und (c) nur für $\kappa = 0.1348$ und $\kappa = 0.1360$ gezeigt. Man beachte, daß die Skala in (d) um einen Faktor 5 kleiner ist als in (e) und (f).

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Struktur des QCD-Vakuums und die Natur des chiralen Phasenübergangs mit Hilfe von Overlap-Fermionen untersucht. Da Overlap-Fermionen exakte chirale Symmetrie und das Atiyah-Singer-Index-Theorem auf dem Gitter implementieren, sind sie besonders dazu geeignet, chirale und topologische Aspekte des QCD-Vakuums zu erforschen. Ein variabler Cutoff hinsichtlich der Eigenwerte des Overlap-Operators erlaubt eine Separation der infraroten nichtperturbativen Freiheitsgrade auf der Skala des Lambda-Parameters der QCD von ultravioletten Fluktuationen auf der Skala des Gitter-Cutoffs. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt in der Untersuchung der durch die niedrig liegenden Eigenmoden des Overlap-Operators aufgezeigten infraroten langreichweitigen Aspekte des Vakuums. Zur Charakterisierung der Struktur und Dimension einer beliebigen in die vierdimensionale Raumzeit eingebetteten Dichte wurden diverse Analysewerkzeuge entwickelt. Diese werden sowohl bei niedriger Temperatur ($T=0$) in der Valenzquark-Approximation der QCD als auch in der Umgebung des Hochtemperatur-Phasenübergangs der vollen QCD zur Beschreibung der Struktur der Moden und der topologischen Dichte, sowie zur Analyse der lokalen Selbstdualität der zugrunde liegenden Eichfelder angewendet. Der große numerische Aufwand der Arbeit liegt in der Berechnung der vollen topologischen Ladungsdichte und der niedrigsten $O(100)$ Eigenmoden des Overlap-Operators, anhand derer diverse topologische Observable extrahiert werden.

Die Simulationen bei $T = 0$ wurden auf Lüscher-Weisz-Eichfeldkonfigurationen in der Valenzquark-Approximation auf $12^3 \times 24$, $16^3 \times 32$ und $24^3 \times 48$ -Gittern der QCDSF-Kollaboration durchgeführt. Die spektrale Dichte der Moden und die Volumen-Abhängigkeit des aus der Dichte ermittelten effektiven chiralen Kondensats ist im Einklang mit den Vorhersagen der Zufallsmatrixtheorie und der chiralen Störungstheorie. Die Betrachtung des Skalierungsverhaltens der inversen Partizipationsverhältnisse (IPRs) erlaubt eine Charakterisierung der Dimension der niedrig liegenden Moden. Während die

Nullmoden zweidimensional sind, dehnen sich die niedrig liegenden Nicht-nullmoden in $d^* = 3$ Dimensionen aus. Die Betrachtung höherer Momente der IPRs und die Anwendung weiterer Methoden zur Charakterisierung der Dimension der Gebiete mit unterschiedlich starker skalarer Dichte $p(x) \geq p_{\text{cut}}$ deckt eine multifraktale niedrigdimensionale Substruktur der Moden auf. Im Bereich des Maximums der skalaren Dichte zeigen die Nichtnullmoden, trotz global verschwindender Chiralität, lokal ein hohes Maß an Chiralität $|X(x)| \approx 1$. Eine Clusteranalyse der zusammenhängenden Bereiche der skalaren Dichte mit $p(x) \geq p_{\text{cut}}$ zeigt, daß die Cluster aller Moden für geringe Cutoffs perkolierende Strukturen bilden, die sich über das gesamte Gitter ausdehnen. Dies ist eine notwendige Voraussetzung, damit die Propagation leichter Hadronen möglich ist. Es konnte gezeigt werden, daß die niedrigsten $\mathcal{O}(40)$ Moden in der Tat die Korrelationsfunktion des Pions sehr gut saturieren. Auch die PCAC-Quarkmassen konnten allein durch die Verwendung der niedrig liegenden Moden sehr gut reproduziert werden. Die wesentliche physikalische Information ist somit in wenigen niedrig liegenden Moden enthalten. Dies motiviert und rechtfertigt unser Vorgehen, physikalisch relevante Strukturen durch ein Trunkieren der spektralen Entwicklung diverser Operatoren zu erforschen. Die Beschränkung auf nur wenige Moden agiert dabei als UV-Filter und entfernt kurzreichweitige Fluktuationen auf der Skala des Gitter-Cutoffs $\mathcal{O}(a)$.

Ein Schwergewicht der Arbeit liegt in dem Vergleich der trunkierten topologischen Ladungsdichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ mit der vollen, ungefilterten Ladungsdichte $q(x)$. Während die gefilterte Dichte ein Bild liefert, das weitgehend im Einklang mit semiklassischen Modellen ist, zeigt die Fluktuationen auf allen Skalen enthaltende „volle“ Dichte eine komplementäre niedrigdimensionale (singuläre) Struktur des QCD-Vakuums. Die Struktur der vollen Ladungsdichte ist durch zwei Vorzeichen-kohärente komplex ineinander geschichtete global dreidimensionale perkolierende Cluster bestimmt. Diese mit semiklassischen Modellen unvereinbare Struktur mit $d^* \approx 3$ ist jedoch notwendig, um die von dem Axiom der Reflexionspositivität geforderte Negativität des Ladungskorrelators $C_{qq}(r)$ für nicht verschwindende Abstände zu realisieren. Wir konnten zeigen, daß im Übergang zum Kontinuum die Negativität der Korrelationsfunktion zunimmt. Eine Clusteranalyse der Ladungsdichten zeigt auch hier multifraktale Substrukturen. So bildet auch die gefilterte Dichte mit $|q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)| \geq q_{\text{cut}}$ bei niedrigem Cutoff q_{cut} ein verdünntes dreidimensionales Netzwerk perkolierender Strukturen. Bei Erhöhung des Cutoffs bilden sich separierte kohärente Cluster endlicher Dicke $\mathcal{O}(\Lambda_{\text{QCD}})$ mit Dimensionen $d^* < 3$. Basierend auf einer trunkierten Version des spektral entwickelten gluonischen Feldstärketensors konnte gezeigt werden, daß diese

Anregungen ein hohes Maß an Selbstdualität $|R(x)| \approx 1$ aufweisen. Ferner ist auch die Chiralität $X(x)$ individueller Moden stark mit der trunkierten Ladungsdichte korreliert. Doch auch die R -Cluster bilden bei größerer Toleranz bzgl. Abweichungen von exakter Selbstdualität ein verdünntes Netzwerk perkolierender Strukturen. Lokal stark (anti-)selbstduale Bereiche sind demnach in ein Vakuum eingebettet, das global keine Ähnlichkeit zu semiklassischen Modellen zeigt.

Im abschließenden Teil der Arbeit wurden in einem hybriden Ansatz Valenz-Overlap-Fermionen auf dynamischen Wilson/Clover-Konfigurationen auf einem $24^3 \times 10$ -Gitter bei Temperaturen in der Nähe des QCD-Übergangs angewendet. Während diese von der DIK (DESY-ITEP-Kanazawa)-Kollaboration generierten Konfigurationen in der Vergangenheit ausschließlich zur Untersuchung der Confinement/Deconfinement bezogenen Aspekte des QCD-Übergangs Verwendung fanden, wurden im Rahmen dieser Arbeit erstmals die fermionischen Aspekte des QCD-Übergangs betrachtet, um zu einem besseren mikroskopischen Verständnis des Übergangs zu kommen.

Wir konnten zeigen, daß der Peak der chiralen Suszeptibilität bei einer Temperatur $T = 0.97 T_c$ liegt, die niedriger ist als die durch Betrachtung der Polyakov-Loop-Suszeptibilität von der DIK-Kollaboration bestimmte kritische Temperatur T_c . Eine nach der Banks-Casher-Relation die Restauration der chiralen Symmetrie signalisierende Lücke im Spektrum deutet sich andererseits erst bei $T = 1.06 T_c$ an. Dies kann als Hinweis gedeutet werden, daß der Hochtemperatur-Übergang der QCD (zumindest im Fall von $N_f = 2$ Wilson/Clover-Fermionen) ein Crossover ist mit einem Übergangsbereich, in dem sich verschiedene gluonische und fermionische Phänomene nicht zwingend bei der gleichen kritischen Temperatur ändern.

Das Öffnen der Lücke im Spektrum wird durch einen starken Anstieg der Lokalisierung der niedrigen Moden vorbereitet. Abgesehen von einigen wenigen, nur zum ersten Paar von Nichtnullmoden gehörenden Moden, die auch bei höheren Temperaturen in die Lücke des Spektrums fallen, verschwindet mit dem Öffnen der spektralen Lücke auch das erhöhte Maß an lokaler Chiralität $X(x)$ der Moden. Auch wird die Kohärenz der Moden, die bei niedrigen Temperaturen zu einem erhöhten Signal von Selbstdualität führt, in der Hochtemperatur-Phase zerstört. Damit werden ausgedehnte perkolierende Bereiche hoher Selbstdualität stark unterdrückt. Dieser Strukturwandel wird auch durch die Korrelationsfunktion der Ladungsdichte reflektiert, die beim Übergang zu höheren Temperaturen negativer wird und damit eine Ladungskompensation entgegengesetzt geladener fragmentierter Cluster an-

deutet. Diese Paarung entgegengesetzt geladener Bereiche, die auch durch eine Clusteranalyse bestätigt wird, zeigt Ähnlichkeiten zu semiklassischen Modellen, die den QCD-Übergang durch eine Paarung von Instantonen und Antiinstantonen modellieren. Doch auch bei endlicher Temperatur zeigt die volle Dichte wie bei $T = 0$ eine globale singuläre Struktur.

Unsere Analysen haben gezeigt, daß sowohl nichtperkolierende Anregungen des Vakuums, die gewisse Ähnlichkeiten zu semiklassischen topologischen Objekten zeigen, als auch niedrigdimensionale perkolierende Strukturen in einem „demokratischen Vakuum“ [218] gemeinsam Relevanz besitzen.

Anhang A

Tabelle der Dimensionen

$q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$	0.00	0.10	0.20	0.30	0.40	0.50
$12^3 \times 24$ volle Dichte	2.7(1)	1.5(1)	1.1(1)	0.7(1)	0.4(1)	0.1(1)
$12^3 \times 24$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 200$ MeV	3.1(1)	1.8(1)	1.5(1)	1.0(1)	0.7(1)	0.2(1)
$12^3 \times 24$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 800$ MeV	3.0(1)	1.8(1)	1.5(1)	1.0(1)	0.7(1)	0.2(1)
$16^3 \times 32$ volle Dichte	2.6(2)	1.5(1)	1.1(1)	0.9(1)	0.5(1)	0.1(1)
$16^3 \times 32$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 200$ MeV	3.0(1)	2.1(2)	1.8(1)	1.2(1)	0.8(1)	0.3(1)
$16^3 \times 32$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 634$ MeV	3.0(1)	1.9(1)	1.7(1)	1.2(1)	0.7(1)	0.3(1)

Tabelle A.1: Mit der Random Walk basierten Methode bestimmte effektive Dimension d^* des größten Clusters der vollen topologischen Dichte $q(x)$ und der trunkierten Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ für 2 verschiedene λ_{cut} . Dimensionen, die sich auf den perkolierenden Bereich der jeweiligen Dichte beziehen sind fett gedruckt. Die Daten wurden über das $12^3 \times 24$ ($16^3 \times 32$)-Ensemble bei $\beta = 8.10$ ($\beta = 8.45$) gemittelt.

$q_{\text{cut}}/q_{\text{max}}$	0.00	0.10	0.20	0.30	0.40	0.50
$12^3 \times 24$ volle Dichte	3.3(1)	3.1(1)	1	1	1	1
$12^3 \times 24$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 200$ MeV	2.5(2)	1	1	1	1	1
$12^3 \times 24$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 800$ MeV	2.9(1)	1.8(1)	1	1	1	1
$16^3 \times 32$ volle Dichte	3.3(1)	3.3(1)	2.5(1)	1	1	1
$16^3 \times 32$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 200$ MeV	1.9(1)	1	1	1	1	1
$16^3 \times 32$ $\lambda_{\text{cut}} \leq 634$ MeV	2.3(1)	1	1	1	1	1

Tabelle A.2: Mit der Methode der überdeckenden Sphäre bestimmte effektive Dimension d^* des größten Clusters der vollen topologischen Dichte $q(x)$ und der trunkierten Dichte $q_{\lambda_{\text{cut}}}(x)$ für 2 verschiedene λ_{cut} . Die Daten wurden über das $12^3 \times 24$ ($16^3 \times 32$)-Ensemble bei $\beta = 8.10$ ($\beta = 8.45$) gemittelt.

$p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$	0.00	0.10	0.20	0.30	0.40
zeromodes	3.6(2)	2.8(2)	2.0(2)	1.4(1)	1.1(1)
1. Nichtnullmode	3.5(1)	2.9(2)	1.9(2)	1.4(1)	1.1(1)
10. Nichtnullmode	3.6(2)	3.0(2)	2.2(2)	1.6(1)	1.1(1)
30. Nichtnullmode	3.5(1)	3.2(2)	2.6(1)	2.0(1)	1.4(1)
50. Nichtnullmode	3.6(2)	3.3(1)	2.8(1)	2.1(1)	1.5(1)
70. Nichtnullmode	3.6(2)	3.4(1)	2.9(1)	2.2(1)	1.6(1)
90. Nichtnullmode	3.5(2)	3.3(2)	3.0(1)	2.4(1)	1.7(1)
120. Nichtnullmode	3.6(2)	3.4(2)	3.1(1)	2.5(1)	1.8(1)

Tabelle A.3: Mit der Random Walk basierten Methode bestimmte effektive Dimension d^* des größten Clusters der skalaren Dichte $p(x)$ für ausgewählte Eigenmoden. Die Daten wurden über das $16^3 \times 32$ -Ensemble bei $\beta = 8.45$ gemittelt. Daten, die sich auf den perkolierenden Bereich beziehen, sind fett gedruckt.

$p_{\text{cut}}/p_{\text{max}}$	0.00	0.10	0.20	0.30	0.40
Nullmoden	1.9(1)	1	1	1	1
1. Nichtnullmode	2.1(1)	1	1	1	1
10. Nichtnullmode	2.5(1)	1	1	1	1
30. Nichtnullmode	2.9(1)	2.3(1)	1	1	1
50. Nichtnullmode	2.9(1)	2.4(1)	1	1	1
70. Nichtnullmode	3.0(1)	2.7(1)	1.9(1)	1	1
90. Nichtnullmode	3.1(1)	2.6(1)	1.9(1)	1	1
120. Nichtnullmode	3.1(1)	2.9(1)	2.3(1)	1	1

Tabelle A.4: Mit der Methode der überdeckenden Kugel bestimmte effektive Dimension d^* des größten Clusters der skalaren Dichte $p(x)$ für ausgewählte Eigenmoden. Die Daten wurden über das $16^3 \times 32$ -Ensemble bei $\beta = 8.45$ gemittelt. Daten, die sich auf den perkolierenden Bereich beziehen, sind fett gedruckt.

Anhang B

Konventionen

γ -Matrizen

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +i \\ 0 & 0 & +i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \gamma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \gamma_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & +i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \end{pmatrix} & \gamma_4 &= \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \gamma_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{B.1}$$

Gell-Mann-Matrizen

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ +i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_3 &= \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ +i & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \\ 0 & +1 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & +i & 0 \end{pmatrix} & \lambda_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{B.2}$$

Eigene Veröffentlichungen

Viele der in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse wurden bereits publiziert. Sie werden in der vorliegenden Arbeit mit [Wn] zitiert.

- [W1] V. Weinberg, „Recent overlap results“, in I.J.D. MacGregor and R. Kaiser: „Hadron Physics“, Taylor & Francis Group LLC, New York (2006).
- [W2] Y. Koma, E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, G. Schierholz, T. Streuer, and V. Weinberg, „Localization properties of the topological charge density and the low lying eigenmodes of overlap fermions“, PoS **LAT2005**, 300 (2006). [arXiv:hep-lat/0509164](#).
- [W3] V. Weinberg, E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, Y. Koma, G. Schierholz, and T. Streuer (DIK) „Probing the chiral phase transition of $N_f = 2$ clover fermions with valence overlap fermions“, PoS **LAT2005**, 171 (2006). [arXiv:hep-lat/0510056](#).
- [W4] E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, Y. Koma, G. Schierholz, T. Streuer, and V. Weinberg, „Probing the topological structure of the QCD vacuum with overlap fermions“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **153**, 328 (2006). [arXiv:hep-lat/0512005](#).
- [W5] V. Weinberg, E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, Y. Koma, G. Schierholz, and T. Streuer, „The QCD vacuum probed by overlap fermions“, PoS **LAT2006**, 078 (2006). [arXiv:hep-lat/0610087](#).
- [W6] E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, Y. Koma, G. Schierholz, T. Streuer, and V. Weinberg, „Vacuum structure as seen by overlap fermions“, AIP Conf. Proc. **892**, 187 (2007). [arXiv:hep-lat/0611007](#).

- [W7] E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, Y. Koma, G. Schierholz, T. Streuer, and V. Weinberg, „Exploring the structure of the quenched QCD vacuum with overlap fermions“, *Phys. Rev.* **D76**, 034506 (2007). [arXiv:0705.0018 \[hep-lat\]](#).
- [W8] V. Weinberg, E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, Y. Koma, Y. Nakamura, G. Schierholz, and T. Streuer (DIK), „The chiral transition on a $24^3 \times 10$ lattice with $N_f = 2$ clover sea quarks studied by overlap valence quarks“, *PoS LAT2007*, 236 (2007). [arXiv:0710.2565 \[hep-lat\]](#).
- [W9] E.-M. Ilgenfritz, K. Koller, Y. Koma, G. Schierholz, T. Streuer, and M. Quandt, „Localization of overlap modes and topological charge, vortices and monopoles in SU(3) LGT“, *PoS LAT2007*, 311 (2007). [arXiv:0710.2607 \[hep-lat\]](#).

Literaturverzeichnis

- [1] S. L. Glashow, „Partial symmetries of weak interactions“, Nucl. Phys. **22**, 579 (1961).
- [2] S. L. Glashow, J. Iliopoulos, and L. Maiani, „Weak interactions with lepton-hadron symmetry“, Phys. Rev. **D2**, 1285 (1970).
- [3] S. Weinberg, „Effects of a neutral intermediate boson in semileptonic processes“, Phys. Rev. **D5**, 1412 (1972).
- [4] S. Weinberg, „A model of leptons“, Phys. Rev. Lett. **19**, 1264 (1967).
- [5] H. Fritzsch, M. Gell-Mann, and H. Leutwyler, „Advantages of the color octet gluon picture“, Phys. Lett. **B47**, 365 (1973).
- [6] S. Weinberg, „Nonabelian gauge theories of the strong interactions“, Phys. Rev. Lett. **31**, 494 (1973).
- [7] J. D. Bjorken, „Asymptotic sum rules at infinite momentum“, Phys. Rev. **179**, 1547 (1969).
- [8] R. P. Feynman, „Very high-energy collisions of hadrons“, Phys. Rev. Lett. **23**, 1415 (1969).
- [9] C.-N. Yang and R. L. Mills, „Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance“, Phys. Rev. **96**, 191 (1954).
- [10] D. J. Gross and F. Wilczek, „Ultraviolet behavior of non-Abelian gauge theories“, Phys. Rev. Lett. **30**, 1343 (1973).
- [11] G. 't Hooft and M. J. G. Veltman, „Regularization and renormalization of gauge fields“, Nucl. Phys. **B44**, 189 (1972).
- [12] G. 't Hooft, „Renormalization of massless Yang-Mills fields“, Nucl. Phys. **B33**, 173 (1971).

- [13] M. Gell-Mann, „A schematic model of baryons and mesons“, Phys. Lett. **8**, 214 (1964).
- [14] G. Zweig, „An SU(3) model for strong interaction symmetry and its breaking II“, CERN-TH-412 (1964).
- [15] K. G. Wilson, „Confinement of quarks“, Phys. Rev. **D10**, 2445 (1974).
- [16] W. M. Yao *et al.* (Particle Data Group), „Review of particle physics“, J. Phys. **G33**, 1 (2006).
- [17] P. Hasenfratz, „Prospects for perfect actions“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63**, 53 (1998). [arXiv:hep-lat/9709110](#).
- [18] P. H. Ginsparg and K. G. Wilson, „A remnant of chiral symmetry on the lattice“, Phys. Rev. **D25**, 2649 (1982).
- [19] H. Neuberger, „Exactly massless quarks on the lattice“, Phys. Lett. **B417**, 141 (1998). [arXiv:hep-lat/9707022](#).
- [20] H. Neuberger, „More about exactly massless quarks on the lattice“, Phys. Lett. **B427**, 353 (1998). [arXiv:hep-lat/9801031](#).
- [21] T. Banks and A. Casher, „Chiral symmetry breaking in confining theories“, Nucl. Phys. **B169**, 103 (1980).
- [22] I. Horváth, N. Isgur, J. McCune, and H. B. Thacker, „Evidence against instanton dominance of topological charge fluctuations in QCD“, Phys. Rev. **D65**, 014502 (2002). [arXiv:hep-lat/0102003](#).
- [23] I. Horváth *et al.*, „Low-dimensional long-range topological charge structure in the QCD vacuum“, Phys. Rev. **D68**, 114505 (2003). [arXiv:hep-lat/0302009](#).
- [24] I. Horváth *et al.*, „On the local structure of topological charge fluctuations in QCD“, Phys. Rev. **D67**, 011501 (2003). [arXiv:hep-lat/0203027](#).
- [25] C. Gattringer, „Testing the self-duality of topological lumps in SU(3) lattice gauge theory“, Phys. Rev. Lett. **88**, 221601 (2002). [arXiv:hep-lat/0202002](#).
- [26] R. P. Feynman, „Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics“, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948).

-
- [27] J. Schwinger, „On the Euclidean structure of relativistic field theory“, Proc. Natl. Acad. Sci. **44**, 956 (1958).
- [28] R. F. Streater and A. S. Wightman, „PCT, spin and statistics, and all that“, Addison-Wesley, Redwood City (1989).
- [29] K. Osterwalder and R. Schrader, „Axioms for Euclidean Green’s functions“, Commun. Math. Phys. **31**, 83 (1973).
- [30] K. Osterwalder and R. Schrader, „Axioms for Euclidean Green’s functions II“, Commun. Math. Phys. **42**, 281 (1975).
- [31] C. Vafa and E. Witten, „Restrictions on symmetry breaking in vector-like gauge theories“, Nucl. Phys. **B234**, 173 (1984).
- [32] J. Goldstone, „Field theories with superconductor solutions“, Nuovo Cim. **19**, 154 (1961).
- [33] J. Goldstone, A. Salam, and S. Weinberg, „Broken symmetries“, Phys. Rev. **127**, 965 (1962).
- [34] Y. Nambu, „Axial vector current conservation in weak interactions“, Phys. Rev. Lett. **4**, 380 (1960).
- [35] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, „Dynamical model of elementary particles based on an analogy with superconductivity. I“, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
- [36] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, „Dynamical model of elementary particles based on an analogy with superconductivity. II“, Phys. Rev. **124**, 246 (1961).
- [37] T.-P. Cheng and L.-F. Li, „Gauge theory of elementary particle physics“, Clarendon Press, Oxford (1984).
- [38] M. Gell-Mann, R. J. Oakes, and B. Renner, „Behavior of current divergences under $SU(3) \times SU(3)$ “, Phys. Rev. **175**, 2195 (1968).
- [39] G. ’t Hooft, „Symmetry breaking through Bell-Jackiw anomalies“, Phys. Rev. Lett. **37**, 8 (1976).
- [40] S. L. Adler, „Axial vector vertex in spinor electrodynamics“, Phys. Rev. **177**, 2426 (1969).
- [41] J. S. Bell and R. Jackiw, „A PCAC puzzle: $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ in the σ model“, Nuovo Cim. **A60**, 47 (1969).

- [42] M. Kremer *et al.*, „Scaling behavior and volume dependence of the SU(2) topological susceptibility“, Nucl. Phys. **B305**, 109 (1988).
- [43] M. Göckeler, A. S. Kronfeld, M. L. Laursen, G. Schierholz, and U. J. Wiese, „Can the topological susceptibility be calculated from SU(N) lattice gauge theories?“, Phys. Lett. **B233**, 192 (1989).
- [44] K. Symanzik, „Continuum limit and improved action in lattice theories (I). Principles and ϕ^4 theory“, Nucl. Phys. **B226**, 187 (1983).
- [45] K. Symanzik, „Continuum limit and improved action in lattice theories (II). O(N) non-linear sigma model in perturbation theory“, Nucl. Phys. **B226**, 205 (1983).
- [46] M. Lüscher and P. Weisz, „On-shell improved lattice gauge theories“, Commun. Math. Phys. **97**, 59 (1985).
- [47] M. Lüscher and P. Weisz, „Computation of the action for on-shell improved lattice gauge theories at weak coupling“, Phys. Lett. **B158**, 250 (1985).
- [48] G. P. Lepage and P. B. Mackenzie, „Viability of lattice perturbation theory“, Phys. Rev. **D48**, 2250 (1993). [arXiv:hep-lat/9209022](#).
- [49] M. G. Alford, W. Dimm, G. P. Lepage, G. Hockney, and P. B. Mackenzie, „Lattice QCD on small computers“, Phys. Lett. **B361**, 87 (1995). [arXiv:hep-lat/9507010](#).
- [50] J. Snippe, „Computation of the one-loop Symanzik coefficients for the square action“, Nucl. Phys. **B498**, 347 (1997). [arXiv:hep-lat/9701002](#).
- [51] C. Gattringer, R. Hoffmann, and S. Schaefer, „Setting the scale for the Lüscher-Weisz action“, Phys. Rev. **D65**, 094503 (2002). [arXiv:hep-lat/0112024](#).
- [52] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, „Absence of neutrinos on a lattice (I). Proof by homotopy theory“, Nucl. Phys. **B185**, 20 (1981).
- [53] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, „Absence of neutrinos on a lattice (II). Intuitive topological proof“, Nucl. Phys. **B193**, 173 (1981).
- [54] K. G. Wilson, „Quarks and strings on a lattice“, Proceedings of the first half of the 1975 international school of subnuclear physics, Erice, Sicily (1977).

-
- [55] B. Sheikholeslami and R. Wohlert, „Improved continuum limit lattice action for QCD with Wilson fermions“, Nucl. Phys. **B259**, 572 (1985).
- [56] R. Wohlert, „Improved continuum limit lattice action for quarks“, DESY 87-069 (1987).
- [57] M. Lüscher, S. Sint, R. Sommer, P. Weisz, and U. Wolff, „Non-perturbative $\mathcal{O}(a)$ improvement of lattice QCD“, Nucl. Phys. **B491**, 323 (1997). [arXiv:hep-lat/9609035](#).
- [58] R. G. Edwards, U. M. Heller, and T. R. Klassen, „Effectiveness of nonperturbative $\mathcal{O}(a)$ improvement in lattice QCD“, Phys. Rev. Lett. **80**, 3448 (1998). [arXiv:hep-lat/9711052](#).
- [59] K. Jansen and R. Sommer (ALPHA), „ $\mathcal{O}(a)$ improvement of lattice QCD with two flavors of Wilson quarks“, Nucl. Phys. **B530**, 185 (1998). [arXiv:hep-lat/9803017](#).
- [60] M. Lüscher, „Exact chiral symmetry on the lattice and the Ginsparg-Wilson relation“, Phys. Lett. **B428**, 342 (1998). [arXiv:hep-lat/9802011](#).
- [61] W. Bietenholz and U. J. Wiese, „Perfect lattice actions for quarks and gluons“, Nucl. Phys. **B464**, 319 (1996). [arXiv:hep-lat/9510026](#).
- [62] T. DeGrand, A. Hasenfratz, and D. Zhu, „Instantons and fixed-point actions in SU(2) gauge theory“, Nucl. Phys. **B475**, 321 (1996). [arXiv:hep-lat/9603015](#).
- [63] Y. Shamir, „Chiral fermions from lattice boundaries“, Nucl. Phys. **B406**, 90 (1993). [arXiv:hep-lat/9303005](#).
- [64] D. B. Kaplan, „A method for simulating chiral fermions on the lattice“, Phys. Lett. **B288**, 342 (1992). [arXiv:hep-lat/9206013](#).
- [65] A. Hasenfratz, P. Hasenfratz, and F. Niedermayer, „Simulating full QCD with the fixed point action“, Phys. Rev. **D72**, 114508 (2005). [arXiv:hep-lat/0506024](#).
- [66] C. Gattringer, I. Hip, and C. B. Lang, „Approximate Ginsparg-Wilson fermions: A first test“, Nucl. Phys. **B597**, 451 (2001). [arXiv:hep-lat/0007042](#).

- [67] W. Bietenholz, „Solutions of the Ginsparg-Wilson relation and improved domain wall fermions“, *Eur. Phys. J.* **C6**, 537 (1999). [arXiv:hep-lat/9803023](#).
- [68] T.-W. Chiu, C.-W. Wang, and S. V. Zenkin, „Chiral structure of the solutions of the Ginsparg-Wilson relation“, *Phys. Lett.* **B438**, 321 (1998). [arXiv:hep-lat/9806031](#).
- [69] T.-W. Chiu and S. V. Zenkin, „Solutions of the Ginsparg-Wilson relation“, *Phys. Rev.* **D59**, 074501 (1999). [arXiv:hep-lat/9806019](#).
- [70] D. Galletly *et al.*, „Hadron spectrum, quark masses and decay constants from light overlap fermions on large lattices“, *Phys. Rev.* **D75**, 073015 (2007). [arXiv:hep-lat/0607024](#).
- [71] S. Capitani, M. Göckeler, R. Horsley, P. E. L. Rakow, and G. Schierholz, „Operator improvement for Ginsparg-Wilson fermions“, *Phys. Lett.* **B468**, 150 (1999). [arXiv:hep-lat/9908029](#).
- [72] P. Hasenfratz, V. Laliena, and F. Niedermayer, „The index theorem in QCD with a finite cut-off“, *Phys. Lett.* **B427**, 125 (1998). [arXiv:hep-lat/9801021](#).
- [73] E. Marinari, G. Parisi, and C. Rebbi, „Monte Carlo simulation of the massive Schwinger model“, *Nucl. Phys.* **B190**, 734 (1981).
- [74] D. Weingarten, „Monte Carlo evaluation of hadron masses in lattice gauge theories with fermions“, *Phys. Lett.* **B109**, 57 (1982).
- [75] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, „Equation of state calculations by fast computing machines“, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [76] M. Creutz, „Overrelaxation and Monte Carlo simulation“, *Phys. Rev.* **D36**, 515 (1987).
- [77] N. Cabibbo and E. Marinari, „A new method for updating $SU(N)$ matrices in computer simulations of gauge theories“, *Phys. Lett.* **B119**, 387 (1982).
- [78] A. Bode, U. M. Heller, R. G. Edwards, and R. Narayanan, „First experiences with HMC for dynamical overlap fermions“, *JLAB-THY-99-40* (1999). [arXiv:hep-lat/9912043](#).

-
- [79] Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabó, „Dynamical overlap fermions, results with HMC algorithm“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **140**, 704 (2005). [arXiv:hep-lat/0409070](#).
- [80] N. Cundy, S. Krieg, A. Frommer, T. Lippert, and K. Schilling, „Dynamical overlap simulations using HMC“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **140**, 841 (2005). [arXiv:hep-lat/0409029](#).
- [81] N. Cundy *et al.*, „Numerical methods for the QCD overlap operator IV: Hybrid Monte Carlo“ (2005). [arXiv:hep-lat/0502007](#).
- [82] N. Cundy, S. Krieg, T. Lippert, and A. Schäfer, „Dynamical overlap fermions with increased topological tunnelling“, PoS **LAT2007**, 030 (2007). [arXiv:0710.1785 \[hep-lat\]](#).
- [83] T. DeGrand and S. Schaefer, „Physics issues in simulations with dynamical overlap fermions“, Phys. Rev. **D71**, 034507 (2005). [arXiv:hep-lat/0412005](#).
- [84] S. Hashimoto *et al.* (JLQCD), „Dynamical overlap fermion at fixed topology“, PoS **LAT2006**, 052 (2006). [arXiv:hep-lat/0610011](#).
- [85] S. Schaefer, „Algorithms for dynamical overlap fermions“, PoS **LAT2006**, 020 (2006). [arXiv:hep-lat/0609063](#).
- [86] M. Göckeler *et al.*, „Simulating at realistic quark masses: Light quark masses“, PoS **LAT2006**, 160 (2006). [arXiv:hep-lat/0610071](#).
- [87] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, and D. Roweth, „Hybrid Monte Carlo“, Phys. Lett. **B195**, 216 (1987).
- [88] J. C. Sexton and D. H. Weingarten, „Hamiltonian evolution for the Hybrid Monte Carlo algorithm“, Nucl. Phys. **B380**, 665 (1992).
- [89] M. Hasenbusch, „Speeding up the Hybrid-Monte-Carlo algorithm for dynamical fermions“, Phys. Lett. **B519**, 177 (2001). [arXiv:hep-lat/0107019](#).
- [90] T. Schäfer and E. V. Shuryak, „Instantons in QCD“, Rev. Mod. Phys. **70**, 323 (1998). [arXiv:hep-ph/9610451](#).
- [91] E. V. Shuryak, „Correlation functions in the QCD vacuum“, Rev. Mod. Phys. **65**, 1 (1993).

- [92] D. I. Diakonov and V. Y. Petrov, „A theory of light quarks in the instanton vacuum“, Nucl. Phys. **B272**, 457 (1986).
- [93] P. Gerhold, E.-M. Ilgenfritz, and M. Müller-Preussker, „An SU(2) KvBLL caloron gas model and confinement“, Nucl. Phys. **B760**, 1 (2007). [arXiv:hep-ph/0607315](#).
- [94] E. Witten, „Instantons, the quark model, and the 1/N expansion“, Nucl. Phys. **B149**, 285 (1979).
- [95] E. Witten, „Current algebra theorems for the U(1) Goldstone boson“, Nucl. Phys. **B156**, 269 (1979).
- [96] I. Horváth *et al.*, „Inherently global nature of topological charge fluctuations in QCD“, Phys. Lett. **B612**, 21 (2005). [arXiv:hep-lat/0501025](#).
- [97] R. C. Brower, D. Chen, J. W. Negele, and E. Shuryak, „Heavy quark potential in the instanton liquid model“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **73**, 512 (1999). [arXiv:hep-lat/9809091](#).
- [98] P. Y. Boyko *et al.*, „Once more on the interrelation between Abelian monopoles and P-vortices in SU(2) LGT“, Nucl. Phys. **B756**, 71 (2006). [arXiv:hep-lat/0607003](#).
- [99] P. de Forcrand and M. D’Elia, „Relevance of center vortices to QCD“, Phys. Rev. Lett. **82**, 4582 (1999). [arXiv:hep-lat/9901020](#).
- [100] V. G. Bornyakov *et al.*, „Remark on the disappearance of topology and chiral symmetry breaking due to the removal of monopoles or vortices“ (2007). [arXiv:0708.3335 \[hep-lat\]](#).
- [101] K. Lee and C. Lu, „SU(2) calorons and magnetic monopoles“, Phys. Rev. **D58**, 025011 (1998). [arXiv:hep-th/9802108](#).
- [102] V. I. Zakharov, „Lower-dimension vacuum defects in lattice Yang-Mills theory“, Phys. Atom. Nucl. **68**, 573 (2005). [arXiv:hep-ph/0410034](#).
- [103] A. M. García-García and J. C. Osborn, „Chiral phase transition as an Anderson transition in the instanton liquid model for QCD“, PoS **LAT2005**, 265 (2006). [arXiv:hep-lat/0509118](#).
- [104] A. M. García-García and J. C. Osborn, „Chiral phase transition and Anderson localization in the instanton liquid model for QCD“, Nucl. Phys. **A770**, 141 (2006). [arXiv:hep-lat/0512025](#).

-
- [105] A. M. García-García and J. C. Osborn, „Chiral phase transition in lattice QCD as a metal-insulator transition“, Phys. Rev. **D75**, 034503 (2007). [arXiv:hep-lat/0611019](#).
- [106] P. W. Anderson, „Absence of diffusion in certain random lattices“, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [107] V. E. Kravtsov and K. A. Muttalib, „New class of random matrix ensembles with multifractal eigenvectors“, Phys. Rev. Lett. **79**, 1913 (1997). [arXiv:cond-mat/9703167](#).
- [108] V. E. Kravtsov, „Spectral statistics at the Anderson transition: Multifractality of wave functions and the violation of the normalization sum rule“, Proceedings of the correlated fermions and transport in mesoscopic systems Moriond conference, Les Arcs (1996). [arXiv:cond-mat/9603166](#).
- [109] D. Galletly *et al.* (QCDSF-UKQCD), „Quark spectra and light hadron phenomenology from overlap fermions with improved gauge field action“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **129**, 453 (2004). [arXiv:hep-lat/0310028](#).
- [110] M. Gürtler *et al.*, „A lattice determination of g_A and $\langle x \rangle$ from overlap fermions“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **140**, 707 (2005). [arXiv:hep-lat/0409164](#).
- [111] M. Gürtler *et al.* (QCDSF), „Non-perturbative renormalisation for overlap fermions“, PoS **LAT2005**, 125 (2006). [arXiv:hep-lat/0510045](#).
- [112] D. Galletly *et al.* (QCDSF), „Nucleon structure from quenched overlap fermions“, PoS **LAT2005**, 363 (2006). [arXiv:hep-lat/0510050](#).
- [113] M. Gürtler *et al.* (QCDSF), „Quark masses from quenched overlap fermions“, PoS **LAT2005**, 077 (2006). [arXiv:hep-lat/0512027](#).
- [114] D. Galletly *et al.*, „Hadron phenomenology from quenched overlap fermions“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **153**, 306 (2006).
- [115] T. Streuer, „Simulation der Quantenchromodynamik mit Overlap-Fermionen“, Doktorarbeit, Freie Universität Berlin (2005).
- [116] J. van den Eshof, A. Frommer, T. Lippert, K. Schilling, and H. A. van der Vorst, „Numerical methods for the QCD overlap operator: I.

- Sign-function and error bounds“, *Comput. Phys. Commun.* **146**, 203 (2002). [arXiv:hep-lat/0202025](#).
- [117] L. Giusti, C. Hoelbling, M. Lüscher, and H. Wittig, „Numerical techniques for lattice QCD in the ϵ -regime“, *Comput. Phys. Commun.* **153**, 31 (2003). [arXiv:hep-lat/0212012](#).
- [118] I. Horváth, „Ginsparg-Wilson relation and ultralocality“, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4063 (1998). [arXiv:hep-lat/9808002](#).
- [119] W. Bietenholz, „The absence of ultralocal Ginsparg-Wilson fermions“, *NORDITA-99-1-HE* (1999). [arXiv:hep-lat/9901005](#).
- [120] P. Hernández, K. Jansen, and M. Lüscher, „Locality properties of Neuberger’s lattice Dirac operator“, *Nucl. Phys.* **B552**, 363 (1999). [arXiv:hep-lat/9808010](#).
- [121] P. K. MacKeown, „Stochastic simulation in physics“, Springer, Singapore (1997).
- [122] I. Hip, T. Lippert, H. Neff, K. Schilling, and W. Schroers, „The consequences of non-normality“, *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* **106**, 1004 (2002). [arXiv:hep-lat/0110155](#).
- [123] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang, „ARPACK users’ guide: Solution of large scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods“ (1997). <http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>.
- [124] M. F. Atiyah and I. M. Singer, „The index of elliptic operators: I“, *Annals Math.* **87**, 484 (1968).
- [125] M. F. Atiyah and G. B. Segal, „The index of elliptic operators: II“, *Annals Math.* **87**, 531 (1968).
- [126] M. F. Atiyah and I. M. Singer, „The index of elliptic operators: III“, *Annals Math.* **87**, 546 (1968).
- [127] M. F. Atiyah and I. M. Singer, „The index of elliptic operators: IV“, *Annals Math.* **93**, 119 (1971).
- [128] M. F. Atiyah and I. M. Singer, „The index of elliptic operators: V“, *Annals Math.* **93**, 139 (1971).

-
- [129] J. J. M. Verbaarschot and T. Wettig, „Random matrix theory and chiral symmetry in QCD“, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **50**, 343 (2000). [arXiv:hep-ph/0003017](#).
- [130] E. V. Shuryak and J. J. M. Verbaarschot, „Random matrix theory and spectral sum rules for the Dirac operator in QCD“, *Nucl. Phys.* **A560**, 306 (1993). [arXiv:hep-th/9212088](#).
- [131] J. J. M. Verbaarschot, „The spectrum of the QCD Dirac operator and chiral random matrix theory: The threefold way“, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2531 (1994). [arXiv:hep-th/9401059](#).
- [132] F. J. Dyson, „The threefold way. Algebraic structure of symmetry groups and ensembles in quantum mechanics“, *J. Math. Phys.* **3**, 1199 (1962).
- [133] J. C. Osborn, D. Toublan, and J. J. M. Verbaarschot, „From chiral random matrix theory to chiral perturbation theory“, *Nucl. Phys.* **B540**, 317 (1999). [arXiv:hep-th/9806110](#).
- [134] T. Wilke, T. Guhr, and T. Wettig, „The microscopic spectrum of the QCD Dirac operator with finite quark masses“, *Phys. Rev.* **D57**, 6486 (1998). [arXiv:hep-th/9711057](#).
- [135] C. W. Bernard and M. F. L. Golterman, „Chiral perturbation theory for the quenched approximation of QCD“, *Phys. Rev.* **D46**, 853 (1992). [arXiv:hep-lat/9204007](#).
- [136] S. R. Sharpe, „Quenched chiral logarithms“, *Phys. Rev.* **D46**, 3146 (1992). [arXiv:hep-lat/9205020](#).
- [137] P. H. Damgaard, „Quenched finite volume logarithms“, *Nucl. Phys.* **B608**, 162 (2001). [arXiv:hep-lat/0105010](#).
- [138] C. Aubin *et al.* (MILC), „The scaling dimension of low lying Dirac eigenmodes and of the topological charge density“, *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* **140**, 626 (2005). [arXiv:hep-lat/0410024](#).
- [139] C. Bernard *et al.*, „More evidence of localization in the low-lying Dirac spectrum“, *PoS LAT2005*, 299 (2006). [arXiv:hep-lat/0510025](#).
- [140] F. V. Gubarev, S. M. Morozov, M. I. Polikarpov, and V. I. Zakharov, „Evidence for fine tuning of fermionic modes in lattice gluodynamics“, *JETP Lett.* **82**, 343 (2005). [arXiv:hep-lat/0505016](#).

- [141] M. I. Polikarpov, F. V. Gubarev, S. M. Morozov, and V. I. Zakharov, „Localization of low lying eigenmodes for chirally symmetric Dirac operator“, PoS **LAT2005**, 143 (2006). [arXiv:hep-lat/0510098](#).
- [142] M. I. Polikarpov, F. V. Gubarev, S. M. Morozov, and S. N. Syritsyn, „Localization of scalar and fermionic eigenmodes and confinement“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **153**, 221 (2006).
- [143] V. I. Zakharov, „Matter of resolution: From quasiclassics to fine tuning“ (2006). [arXiv:hep-ph/0602141](#).
- [144] V. I. Zakharov, „Shrinking fermionic modes, on the lattice and in the continuum“ (2006). [arXiv:hep-ph/0612341](#).
- [145] V. I. Zakharov, „From confining fields on the lattice to higher dimensions in the continuum“, Braz. J. Phys. **37**, 165 (2007). [arXiv:hep-ph/0612342](#).
- [146] P. de Forcrand, „Localization properties of fermions and bosons“, AIP Conf. Proc. **892**, 29 (2007). [arXiv:hep-lat/0611034](#).
- [147] P. Markos, „Numerical analysis of the Anderson localization“, Acta Physica Slovaca **56**, 561 (2006). [arXiv:cond-mat/0609580](#).
- [148] J. Greensite, Š. Olejník, M. I. Polikarpov, S. N. Syritsyn, and V. I. Zakharov, „Localized eigenmodes of covariant Laplacians in the Yang-Mills vacuum“, Phys. Rev. **D71**, 114507 (2005). [arXiv:hep-lat/0504008](#).
- [149] C. Gattringer, M. Göckeler, P. E. L. Rakow, S. Schaefer, and A. Schäfer, „A comprehensive picture of topological excitations in finite temperature lattice QCD“, Nucl. Phys. **B618**, 205 (2001). [arXiv:hep-lat/0105023](#).
- [150] T. DeGrand and A. Hasenfratz, „Density peaks and chiral peaks of fermion eigenmodes in QCD“, Phys. Rev. **D65**, 014503 (2002). [arXiv:hep-lat/0103002](#).
- [151] R. G. Edwards and U. M. Heller, „Are topological charge fluctuations in QCD instanton dominated?“, Phys. Rev. **D65**, 014505 (2002). [arXiv:hep-lat/0105004](#).
- [152] I. Hip, T. Lippert, H. Neff, K. Schilling, and W. Schroers, „Instanton dominance of topological charge fluctuations in QCD?“, Phys. Rev. **D65**, 014506 (2002). [arXiv:hep-lat/0105001](#).

-
- [153] T. Blum *et al.*, „Chirality correlation within Dirac eigenvectors from domain wall fermions“, Phys. Rev. **D65**, 014504 (2002). arXiv:hep-lat/0105006.
- [154] N. Cundy, M. Teper, and U. Wenger, „Topology and chiral symmetry breaking in $SU(N_c)$ gauge theories“, Phys. Rev. **D66**, 094505 (2002). arXiv:hep-lat/0203030.
- [155] P. Hasenfratz, S. Hauswirth, T. Jörg, F. Niedermayer, and K. Holland, „Testing the fixed-point QCD action and the construction of chiral currents“, Nucl. Phys. **B643**, 280 (2002). arXiv:hep-lat/0205010.
- [156] G. Veneziano, „U(1) without instantons“, Nucl. Phys. **B159**, 213 (1979).
- [157] R. J. Crewther, „Chirality selection rules and the U(1) problem“, Phys. Lett. **B70**, 349 (1977).
- [158] H. Leutwyler and A. Smilga, „Spectrum of Dirac operator and role of winding number in QCD“, Phys. Rev. **D46**, 5607 (1992).
- [159] B. L. Ioffe, „Correlator of topological charge densities at low Q^2 in QCD: Connection with proton spin problem“, Heavy Ion Phys. **9**, 29 (1999). arXiv:hep-ph/9901223.
- [160] M. Lüscher, „Topology of lattice gauge fields“, Commun. Math. Phys. **85**, 39 (1982).
- [161] A. Phillips and D. Stone, „Lattice gauge fields, principal bundles and the calculation of topological charge“, Commun. Math. Phys. **103**, 599 (1986).
- [162] B. Berg, „Dislocations and topological background in the lattice O(3) σ -model“, Phys. Lett. **B104**, 475 (1981).
- [163] J. Hoek, M. Teper, and J. Waterhouse, „Topology and the η' mass in SU(3) lattice gauge theory“, Phys. Lett. **B180**, 112 (1986).
- [164] J. Hoek, M. Teper, and J. Waterhouse, „Topological fluctuations and susceptibility in SU(3) lattice gauge theory“, Nucl. Phys. **B288**, 589 (1987).
- [165] E.-M. Ilgenfritz, M. L. Laursen, G. Schierholz, M. Müller-Preussker, and H. Schiller, „First evidence for the existence of instantons in the quantized SU(2) lattice vacuum“, Nucl. Phys. **B268**, 693 (1986).

- [166] M. Falcioni, M. L. Paciello, G. Parisi, and B. Taglienti, „Again on SU(3) glueball mass“, Nucl. Phys. **B251**, 624 (1985).
- [167] M. Albanese *et al.* (APE), „Glueball masses and string tension in lattice QCD“, Phys. Lett. **B192**, 163 (1987).
- [168] A. Hasenfratz and F. Knechtli, „Flavor symmetry and the static potential with hypercubic blocking“, Phys. Rev. **D64**, 034504 (2001). [arXiv:hep-lat/0103029](#).
- [169] D. A. Smith and M. J. Teper (UKQCD), „Topological structure of the SU(3) vacuum“, Phys. Rev. **D58**, 014505 (1998). [arXiv:hep-lat/9801008](#).
- [170] M. García Pérez, O. Philipsen, and I.-O. Stamatescu, „Cooling, physical scales and topology“, Nucl. Phys. **B551**, 293 (1999). [arXiv:hep-lat/9812006](#).
- [171] T. DeGrand, A. Hasenfratz, and D. Zhu, „Scaling and topological charge of a fixed point action for SU(2) gauge theory“, Nucl. Phys. **B478**, 349 (1996). [arXiv:hep-lat/9604018](#).
- [172] M. Feurstein, E.-M. Ilgenfritz, M. Müller-Preussker, and S. Thurner, „Topology at the deconfinement transition uncovered by inverse blocking in SU(2) pure gauge theory with fixed point action“, Nucl. Phys. **B511**, 421 (1998). [arXiv:hep-lat/9611024](#).
- [173] T. DeGrand, A. Hasenfratz, and T. G. Kovács, „Topological structure in the SU(2) vacuum“, Nucl. Phys. **B505**, 417 (1997). [arXiv:hep-lat/9705009](#).
- [174] A. Ali Khan *et al.* (CP-PACS), „Topological susceptibility in lattice QCD with two flavors of dynamical quarks“, Phys. Rev. **D64**, 114501 (2001). [arXiv:hep-lat/0106010](#).
- [175] S. Dürr, „Gauge action improvement and smearing“, Comput. Phys. Commun. **172**, 163 (2005). [arXiv:hep-lat/0409141](#).
- [176] S. Dürr, Z. Fodor, C. Hoelbling, and T. Kurth, „Precision study of the SU(3) topological susceptibility in the continuum“, JHEP **04**, 055 (2007). [arXiv:hep-lat/0612021](#).
- [177] L. Giusti, M. Lüscher, P. Weisz, and H. Wittig, „Lattice QCD in the ϵ -regime and random matrix theory“, JHEP **11**, 023 (2003). [arXiv:hep-lat/0309189](#).

-
- [178] L. Giusti, S. Petrarca, and B. Taglienti, „Large statistics study of the topological charge distribution in the SU(3) gauge theory“, PoS **LAT2006**, 058 (2006). [arXiv:0705.3151](#) [[hep-lat](#)].
- [179] E. Seiler and I.-O. Stamatescu, „Some remarks on the Witten-Veneziano formula for the η' mass“, MPI-PAE/PTh 10/87 (1987).
- [180] E. Seiler, „Some more remarks on the Witten-Veneziano formula for the η' mass“, Phys. Lett. **B525**, 355 (2002). [arXiv:hep-th/0111125](#).
- [181] I. Montvay and G. Münster, „Quantum fields on a lattice“, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, Cambridge (1994).
- [182] I. Horváth *et al.*, „The negativity of the overlap-based topological charge density correlator in pure-gluon QCD and the non-integrable nature of its contact part“, Phys. Lett. **B617**, 49 (2005). [arXiv:hep-lat/0504005](#).
- [183] A. Hasenfratz, „Spatial correlation of the topological charge in pure SU(3) gauge theory and in QCD“, Phys. Lett. **B476**, 188 (2000). [arXiv:hep-lat/9912053](#).
- [184] K. F. Liu, „Simulation of lattice gauge action from the overlap operator“, PoS **LAT2006**, 056 (2006). [arXiv:hep-lat/0609033](#).
- [185] K. F. Liu, A. Alexandru, and I. Horváth, „Gauge field strength tensor from the overlap Dirac operator“, Phys. Lett. **B659**, 773 (2008). [arXiv:hep-lat/0703010](#).
- [186] C. R. Allton *et al.* (UKQCD), „Gauge invariant smearing and matrix correlators using Wilson fermions at $\beta = 6.2$ “, Phys. Rev. **D47**, 5128 (1993). [arXiv:hep-lat/9303009](#).
- [187] T. DeGrand and A. Hasenfratz, „Low-lying fermion modes, topology and light hadrons in quenched QCD“, Phys. Rev. **D64**, 034512 (2001). [arXiv:hep-lat/0012021](#).
- [188] T. Blum *et al.*, „Quenched lattice QCD with domain wall fermions and the chiral limit“, Phys. Rev. **D69**, 074502 (2004). [arXiv:hep-lat/0007038](#).
- [189] W. H. Press *et al.*, „Numerical recipes in C“, Cambridge University Press, Cambridge (1994).

- [190] T. Matsubara, „A new approach to quantum-statistical mechanics“, *Prog. Theor. Phys.* **14**, 351 (1955).
- [191] A. M. Polyakov, „Thermal properties of gauge fields and quark liberation“, *Phys. Lett.* **B72**, 477 (1978).
- [192] L. Susskind, „Lattice models of quark confinement at high temperature“, *Phys. Rev.* **D20**, 2610 (1979).
- [193] B. Svetitsky and L. G. Yaffe, „Critical behavior at finite temperature confinement transitions“, *Nucl. Phys.* **B210**, 423 (1982).
- [194] P. de Forcrand and O. Philipsen, „Towards the QCD phase diagram“, *PoS LAT2006*, 130 (2006). [arXiv:hep-lat/0611027](#).
- [195] R. D. Pisarski and F. Wilczek, „Remarks on the chiral phase transition in chromodynamics“, *Phys. Rev.* **D29**, 338 (1984).
- [196] Y. Aoki, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabó, „The QCD transition temperature: Results with physical masses in the continuum limit“, *Phys. Lett.* **B643**, 46 (2006). [arXiv:hep-lat/0609068](#).
- [197] C. Bernard *et al.* (MILC), „QCD thermodynamics with three flavors of improved staggered quarks“, *Phys. Rev.* **D71**, 034504 (2005). [arXiv:hep-lat/0405029](#).
- [198] G. Cossu, M. D’Elia, A. Di Giacomo, and C. Pica, „A test of first order scaling in $N_f = 2$ QCD“, *PoS LAT2007*, 219 (2007). [arXiv:0710.0174 \[hep-lat\]](#).
- [199] F. Karsch, „Recent lattice results on finite temperature and density QCD, part II“, *PoS LAT2007*, 015 (2007). [arXiv:0711.0661 \[hep-lat\]](#).
- [200] A. Gray *et al.*, „The Υ spectrum and m_b from full lattice QCD“, *Phys. Rev.* **D72**, 094507 (2005). [arXiv:hep-lat/0507013](#).
- [201] V. G. Bornyakov *et al.* (DIK), „Finite temperature QCD with two flavors of non-perturbatively improved Wilson fermions“, *Phys. Rev.* **D71**, 114504 (2005). [arXiv:hep-lat/0401014](#).
- [202] V. G. Bornyakov *et al.*, „Critical temperature in QCD with two flavors of dynamical quarks“, *PoS LAT2005*, 157 (2006). [arXiv:hep-lat/0509122](#).

-
- [203] V. G. Bornyakov *et al.*, „Finite temperature lattice QCD with two flavors of improved Wilson fermions“, PoS **LAT2007**, 171 (2007). [arXiv:0711.1427 \[hep-lat\]](#).
- [204] Y. Maezawa *et al.*, „Thermodynamics of two-flavor lattice QCD with an improved Wilson quark action at non-zero temperature and density“, J. Phys. **G34**, 651 (2007). [arXiv:hep-lat/0702005](#).
- [205] M. Cheng *et al.*, „The transition temperature in QCD“, Phys. Rev. **D74**, 054507 (2006). [arXiv:hep-lat/0608013](#).
- [206] Y. Aoki, G. Endrődi, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabó, „The order of the quantum chromodynamics transition predicted by the standard model of particle physics“, Nature **443**, 675 (2006). [arXiv:hep-lat/0611014](#).
- [207] K. Kanaya and S. Kaya, „Critical exponents of a three dimensional O(4) spin model“, Phys. Rev. **D51**, 2404 (1995). [arXiv:hep-lat/9409001](#).
- [208] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, and A. Muñoz Sudupe, „Finite size effects on measures of critical exponents in $d = 3$ O(N) models“, Phys. Lett. **B387**, 125 (1996). [arXiv:cond-mat/9606203](#).
- [209] D. B. Renner *et al.* (LHP), „Hadronic physics with domain-wall valence and improved staggered sea quarks“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **140**, 255 (2005). [arXiv:hep-lat/0409130](#).
- [210] R. G. Edwards *et al.* (LHPC), „Hadron structure with light dynamical quarks“, PoS **LAT2005**, 056 (2006). [arXiv:hep-lat/0509185](#).
- [211] R. G. Edwards *et al.*, „Nucleon structure in the chiral regime with domain wall fermions on an improved staggered sea“, PoS **LAT2006**, 121 (2006). [arXiv:hep-lat/0610007](#).
- [212] K. C. Bowler, B. Joó, R. D. Kenway, C. M. Maynard, and R. J. Tweedie (UKQCD), „Lattice QCD with mixed actions“, JHEP **08**, 003 (2005). [arXiv:hep-lat/0411005](#).
- [213] N. Garron and L. Scorzato, „Results from overlap valence quarks on a twisted mass sea“, PoS **LAT2007**, 083 (2007). [arXiv:0710.1582 \[hep-lat\]](#).

- [214] O. Bär, G. Rupak, and N. Shores, „Simulations with different lattice Dirac operators for valence and sea quarks“, Phys. Rev. **D67**, 114505 (2003). [arXiv:hep-lat/0210050](#).
- [215] T. Ishikawa *et al.*, „2 + 1 flavor light hadron spectrum and quark masses with the $\mathcal{O}(a)$ improved Wilson-clover quark formalism“, PoS **LAT2006**, 181 (2006). [arXiv:hep-lat/0610050](#).
- [216] R. G. Edwards, U. M. Heller, J. Kiskis, and R. Narayanan, „Topology and chiral symmetry in finite temperature QCD“, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **83**, 479 (2000). [arXiv:hep-lat/9908036](#).
- [217] E.-M. Ilgenfritz and E. V. Shuryak, „Quark induced correlations between instantons drive the chiral phase transition“, Phys. Lett. **B325**, 263 (1994). [arXiv:hep-ph/9401285](#).
- [218] F. Bruckmann, „Exploring the QCD vacuum – (some) recent developments in confinement and topology“, PoS **LAT2007**, 006 (2007). [arXiv:0710.2788 \[hep-lat\]](#).

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Volkard Linke und Herrn Prof. Gerrit Schierholz für die Vergabe der Arbeit und die Bereitstellung einer Doktorandenstelle zunächst an der FU Berlin und anschließend am DESY Zeuthen bedanken. Herrn Prof. Schierholz danke ich für die stetige Betreuung der Arbeit am DESY Zeuthen und für viele wertvolle Ideen, sowie für die Ermöglichung der Teilnahme an zahlreichen internationalen Konferenzen und Workshops in sieben Ländern dieser Erde. Dort wurden viele für diese Arbeit relevante Einblicke in den Stand der Forschung gewonnen und es konnten wichtige Kontakte initiiert werden. Ein besonderes Privileg war es, zweimal in Japan Ergebnisse dieser Arbeit vortragen zu dürfen. Damit konnte mein Interesse für die Physik und dieses Land erstmals verbunden werden.

Mein herzlicher Dank gilt vor allem auch Herrn Dr. Ernst-Michael Ilgenfritz. Egal zu welcher Tages- oder Nachtzeit stand er mir stets hilfreich zur Seite und hat die vorliegende Arbeit mit vielen Ideen und Vorschlägen vorange-
trieben.

Die Untersuchungen bei $T = 0$ entstanden innerhalb der QCDSF-Kollaboration. Unter ihren Mitgliedern bin ich in erster Linie Herrn Dr. Thomas Streuer zu besonderem Dank verpflichtet. Ohne die großzügige Überlassung seiner hochoptimierten Assemblerrouitinen wären die Simulationen der vorliegenden Arbeit sicher nie soweit fortgeschritten. Besonders danken möchte ich auch Herrn Prof. Karl Koller, der während meines Studiums mein Interesse an Gittereichtheorien erstmals geweckt und den Weg in dieses spannende Gebiet geebnet hat.

Unter den Mitgliedern der DIK-Kollaboration danke ich Herrn Prof. Tsuneo Suzuki für die Einladung an die Universität Kanazawa, sowie Herrn Dr. Yoshifumi Nakamura für die Bereitstellung der dynamischen Wilson-Clover-Konfigurationen zur Simulation bei endlicher Temperatur. Auch Herrn Dr. Yoshiaki Koma möchte ich für die Kollaboration danken.

Bei Herrn Dr. Thomas Streuer, Herrn Dr. Wolfgang Bietenholz und Herrn Dr. Wolfram Schroers möchte ich mich für die Durchsicht der Arbeit bedanken.

Dank gilt auch den Administratoren des HLRN Berlin, des FZ Jülich, der PC-Farm am DESY Zeuthen, des CIP-Pools der Sektion Physik der LMU München, sowie des LRZ München für die Aufrechterhaltung des Rechenbetriebs sowie den Support. Ohne die von diesen Institutionen zur Verfügung gestellten Rechen- und Speicherplatzressourcen wären die numerisch äußerst aufwendigen Rechnungen der vorliegenden Arbeit niemals möglich gewesen.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meinen lieben Eltern bedanken, die stets für mich da waren und alle meine Interessen gefördert haben.