

Kapitel 2

Quantenchromodynamik auf dem Gitter

2.1 Quantenchromodynamik

In der Quantenchromodynamik, der Eichfeldtheorie der starken Wechselwirkung, werden die Quarks durch Spinorfelder $\psi(x)$ beschrieben, die unter lokalen Eichtransformationen $g(x) \in SU(3)$ nach der fundamentalen Darstellung von $SU(3)$ transformieren:

$$\psi(x) \rightarrow g(x)\psi(x). \quad (2.1)$$

Das Eichfeld $A_\mu(x)$, das Werte in der Liealgebra $su(3)$ annimmt, beschreibt die Gluonen. Die Euklidische Wirkung der Theorie ist

$$S = \int d^4x \frac{1}{2} \text{tr} F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x) + \sum_f \bar{\psi}_f(x) (\not{D} + m_f) \psi_f(x) \quad (2.2)$$

mit dem Feldstärketensor

$$F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + g[A_\mu, A_\nu] \quad (2.3)$$

und dem Diracoperator

$$\not{D} = \sum_\mu \gamma_\mu (\partial_\mu + igA_\mu). \quad (2.4)$$

In der Pfadintegralformulierung der Quantenfeldtheorie ergeben sich die Erwartungswerte physikalischer Observablen aus Korrelationsfunktionen

$$\langle O_1(x_1) O_2(x_2) \rangle = \int DAD\psi D\bar{\psi} O_1(x_1) O_2(x_2) e^{-S(A, \psi, \bar{\psi})} \quad (2.5)$$

lokaler Operatoren O_i .

Eine charakteristische Eigenschaft nichtabelscher Eichtheorien ist *asymptotische Freiheit*: Bei hohen Energien wird die Wechselwirkung zwischen den Teilchen schwach; in diesem Bereich lassen sich Ausdrücke wie (2.5) mit den Methoden der Störungstheorie behandeln. Im Bereich kleiner Wechselwirkungsenergien werden die Kräfte zwischen den Quarks und Gluonen hingegen stark, und die Störungstheorie ist nicht länger anwendbar.

2.2 Diskretisierung

Um Pfadintegralen wie in (2.5) einen strengen Sinn zu geben, muß die Feldtheorie regulärisiert werden.

Eine Regularisierung, die es ermöglicht, Pfadintegrale nichtstörungstheoretisch zu berechnen, ist die Gitterregularisierung. Der kontinuierliche Raum wird dabei durch ein diskretes Gitter

$$\Gamma = \{(an_1, an_2, an_3, an_4) | n_\mu \in \mathbb{Z}^4\} \quad (2.6)$$

mit Gitterabstand a ersetzt. Die Spinorfelder sind nur auf den Gitterpunkten $x \in \Gamma$ definiert.

In der Kontinuums-QCD beschreibt das Eichfeld $A_\mu(x) \in su(3)$ den Paralleltransport zwischen zwei infinitesimal benachbarten Punkten. Da es in der Gitterformulierung keine infinitesimalen Abstände gibt, formuliert man die Eichfeldwirkung mit Hilfe des Paralleltransportes $U_\mu(x) \in SU(3)$ zwischen zwei Punkten x und $x + \hat{\mu}$. (Mit $\hat{\mu}$ bezeichnen wir den Einheitsvektor in μ -Richtung; die Verbindungsstrecke zweier benachbarter Gitterpunkte x und $x + \hat{\mu}$ wird „Link“ genannt.) Der Zusammenhang zwischen A_μ und U_μ ist durch das pfadgeordnete Integral

$$U_\mu(x) = \mathcal{P} \exp g \int_x^{x+\hat{\mu}} dx A_\mu(x) \quad (2.7)$$

gegeben. Unter einer lokalen Eichtransformation $g(x)$ transformieren die Felder wie folgt:

$$\psi(x) \rightarrow g(x)\psi(x) \quad (2.8)$$

$$\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x)g(x)^\dagger \quad (2.9)$$

$$U_\mu(x) \rightarrow g(x)U_\mu(x)g(x + \hat{\mu})^\dagger \quad (2.10)$$

Aus den auf den Gitterpunkten bzw. Links definierten Feldern $\psi(x)$ und $U_\mu(x)$ wird eine Wirkung $S(\psi, U)$ gebildet; diese muß eichinvariant sein und für $a \rightarrow 0$ in die Kontinuumswirkung (2.2) übergehen.

Letztendlich muß der Grenzübergang $a \rightarrow 0$ durchgeführt werden, um Ergebnisse im Kontinuum zu erhalten. Dies geschieht in numerischen Simulationen dadurch, daß die Theorie bei verschiedenen Gitterabständen a_i (bzw. verschiedenen Kopplungen β_i) simuliert und die Ergebnisse anschließend zu $a = 0$ extrapoliert werden. Für die vorliegende Arbeit haben wir nur Simulationen bei einem festen Wert des Gitterabstandes durchgeführt, so daß wir die Kontinuumsextrapolation nicht durchführen können, was zu einem systematischen Fehler in unseren Ergebnissen führt.

Die einfachste Möglichkeit, die Eichfeldwirkung $S = \int d^4x \frac{1}{2} \text{tr} (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu})$ zu diskretisieren, ist durch die Wilson-Wirkung

$$S_W = \beta \sum_P (1 - \frac{1}{3} \text{re tr } U_P) \quad (2.11)$$

gegeben. Die Summation in (2.11) läuft über alle Plaketten $P = (x, \mu, \nu)$ im Gitter mit

$$U_P = U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + \hat{\mu} + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x). \quad (2.12)$$

Der Parameter β hängt mit der Kopplungskonstanten g gemäß $\beta = \frac{6}{g^2}$ zusammen; aus (2.7) folgt, daß die Wilson-Wirkung im Kontinuumslimit in den Eichfeldanteil der Kontinuumswirkung (2.2) übergeht. Der Diskretisierungsfehler ist von der Ordnung $O(a^2)$.

Wie von Symanzik gezeigt wurde [4], ist möglich, die Diskretisierungsfehler zu verringern, indem der Gitterwirkung Operatoren höherer Dimension hinzugefügt werden. Für die Eichfeldwirkung läßt sich dies erreichen, indem der Wirkung Wilson-Loops größerer Länge hinzugefügt werden. Wir haben dazu in dieser Arbeit die Lüscher-Weisz-Wirkung [5] verwendet, die außer der Plakette noch zwei Wilson-Loops der Länge sechs beinhaltet („Rechtecke“ bzw. „Parallelogramme“):

$$S_{LW}(U) = \beta \sum_P (1 - \frac{1}{3} \text{re tr } U_P) \quad (2.13)$$

$$+ \beta_R \sum_{\text{Recht.}} (1 - \frac{1}{3} \text{re tr } U_R) + \beta_P \sum_{\text{Par.}} (1 - \frac{1}{3} \text{re tr } U_{pg}). \quad (2.14)$$

Die einzelnen Summen laufen jeweils über alle Plaketten, „Rechtecke“ bzw. „Parallelogramme“ im Gitter. Um Diskretisierungsfehler zu eliminieren, müssen die Koeffizienten β_R , β_P geeignet gewählt werden. In [6] wurde in Mittelfeld-verbesselter Störungstheorie folgende Bedingung hergeleitet:

$$\beta_R = -\frac{\beta}{20u_0^2}(1 + 0.4805\alpha) \quad (2.15)$$

$$\beta_P = -\frac{\beta}{u_0^2}0.03325\alpha \quad (2.16)$$

mit

$$u_0 = (\frac{1}{3} \text{re tr } \langle U \rangle)^{1/4}, \quad (2.17)$$

$$\alpha = -\frac{\ln \frac{1}{3} \text{re tr } \langle U \rangle}{3.06839}, \quad (2.18)$$

wobei $\langle U \rangle$ der Erwartungswert der Plakette ist. Wir haben in dieser Arbeit $\beta = 8.45$ verwendet; in [7] wurden die Parameter β_P, β_R gemäß (2.15)-(2.18) bestimmt. Bei der Simulierung von Overlap-Fermionen hat die Lüscher-Weisz-Wirkung den Vorteil, daß sie zu Eichfeldern führt, auf denen der Overlap-Operator numerisch einfacher zu berechnen ist als auf Eichfeldern, die mit der Wilson-Wirkung (bei gleichem Gitterabstand) erzeugt wurden; siehe hierzu auch die Diskussion in Abschnitt 3.3.

Um den physikalischen Gitterabstand zu bestimmen, muß der dimensionslose Wert $\hat{O} = a^{d_O} O$ einer Observablen O auf dem Gitter gemessen werden, wobei d_O die (Massen-) Dimension von O bezeichnet. Mithilfe des (bekannten) experimentellen Wertes O_{exp} ergibt sich dann

$$a = \left(\frac{\hat{O}}{O_{\text{exp}}} \right)^{1/d_O}. \quad (2.19)$$

Wir haben in dieser Arbeit die Pion-Zerfallskonstante f_π (vgl. Abschnitt 6.1.2) zur Bestimmung des Gitterabstandes benutzt. Diese Observable hat den Vorteil, daß sie sich

auf dem Gitter mit relativ großer Genauigkeit bestimmen läßt und daß ihr experimenteller Wert ebenfalls sehr genau bekannt ist. Damit erhalten wir $a = 0.105(15)$ fm. Da wir nur bei einem Wert des Gitterabstandes Simulationen durchgeführt haben, können wir weder die Kontinuumsextrapolation ausführen, noch den systematischen Fehler, der vom endlichen Gitterabstand hervorgerufen wird, bestimmen. Aufgrund der guten Skalierungseigenschaften der Lüscher-Weisz-Wirkung[6] gehen wir davon aus, daß die Diskretisierungsfehler beim von uns betrachteten Gitterabstand die Größenordnung von 10% nicht übersteigen.

Die fermionische Wirkung

$$S_f^{Kont} = \int d^4x \bar{\psi}(x) (\not{D} + m) \psi(x) \quad (2.20)$$

wird diskretisiert, indem der Dirac-Operator $\not{D} + m = \gamma_\mu \partial_\mu + m$ durch einen diskreten Operator $D(x, y)$ ersetzt wird:

$$S_f = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D(x, y) \psi(y). \quad (2.21)$$

Für die Diskretisierung des Diracoperators spielt die chirale Symmetrie der QCD eine entscheidende Rolle. Wir werden den Diracoperator im Zusammenhang mit der Implementierung der chiralen Symmetrie auf dem Gitter in Kapitel 3 diskutieren.

Die in Gl. (2.5) auftretenden Pfadintegrale werden auf dem Gitter zu Produkten von gewöhnlichen Integralen:

$$\int DU D\psi D\bar{\psi} = \prod_{x,\mu} \int d\psi(x) \int d\bar{\psi}(x) \int dU_\mu(x). \quad (2.22)$$

Dabei sind die fermionischen Integrale als Grassmann-Integrale zu verstehen.

2.3 Monte Carlo-Simulation

Die Grassmann-Integrale in Gl. (2.22) können analytisch berechnet werden. Insbesondere gilt für die Partitionsfunktion

$$Z = \int DU D\psi D\bar{\psi} e^{-S_g(U) - \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D(x,y) \psi(y)} = \int DU e^{-S_{\text{eff}}(U)} \quad (2.23)$$

mit der effektiven bosonischen Wirkung

$$S_{\text{eff}}(U) = S_g(U) - \ln \det D(U). \quad (2.24)$$

Auch in Korrelationsfunktionen wie z.B.

$$\langle \psi(x_1) \bar{\psi}(y_1) \dots \psi(x_n) \bar{\psi}(y_n) \rangle = \frac{1}{Z} \int DU D\psi D\bar{\psi} e^{-S(U, \psi, \bar{\psi})} \psi(x_1) \dots \bar{\psi}(y_n) \quad (2.25)$$

können die Fermionfelder nach den Rechenregeln für Grassmann-Integrale ausintegriert werden.

Somit bleiben noch Integrale der Form

$$\int DU e^{-S_{\text{eff}}(U)} O(U) = \prod_{x,\mu} \int dU_\mu(x) e^{-S_{\text{eff}}(U)} O(U) \quad (2.26)$$

zu berechnen.

Aufgrund der großen Zahl von Integrationsvariablen in Gl. (2.26) ist die einzige praktikable Möglichkeit der numerischen Berechnung durch eine Monte-Carlo-Integration gegeben: Dazu wird eine Anzahl N_{MC} von Eichfeldkonfigurationen U_i ($i = 1 \dots N_{MC}$) gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p(U) \propto e^{-S_{\text{eff}}(U)} \quad (2.27)$$

erzeugt; für $N_{MC} \rightarrow \infty$ gilt dann

$$\frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} O(U_i) \rightarrow \frac{1}{Z} \int DU e^{-S_{\text{eff}}(U)} O(U). \quad (2.28)$$

2.4 Valenzquarknäherung

Nach dem Ausintegrieren der Fermionen enthält die effektive bosonische Wirkung den Term

$$\ln \det D(U). \quad (2.29)$$

Unabhängig von der konkreten Form des Diracoperators ist dieser Term immer nichtlokal, d.h. er koppelt jeden Link $U_\mu(x)$ mit jedem anderen Link. (Im Gegensatz dazu koppelt die Eichfeldwirkung jeden Link nur mit einer kleinen Zahl benachbarter Links). Dies stellt ein großes Problem für numerische Simulationen dar, da Simulationsalgorithmen für nichtlokale Wirkungen einen hohen Rechenbedarf haben. Daher bedeutet es eine enorme numerische Vereinfachung, in den Pfadintegralen die Näherung

$$\ln \det D \rightarrow 1 \quad (2.30)$$

zu machen; dies ist die *Valenzquarknäherung*: Die Valenzquarks werden korrekt behandelt, während die Seequarks ignoriert werden. Wir werden in dieser Arbeit stets die Valenzquarknäherung der QCD betrachten. Somit werden die Eichfeldkonfigurationen also gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p(U) \propto e^{-S_g(U)} \quad (2.31)$$

erzeugt, d.h. die Eichfelder hängen nicht von der fermionischen Wirkung ab.

