

Kapitel 3

Chirale Symmetrie

3.1 Kontinuum

Die Kontinuums-Wirkung der Quantenchromodynamik ist invariant unter einer Gruppe von Symmetrien, die als *chirale Symmetrien* bezeichnet werden. Die genaue Gestalt der Symmetriegruppe hängt von der Anzahl n_f der Quarkflavours und von den Quarkmassen ab. Zunächst betrachten wir den Fall von n_f masselosen Quarks; in diesem Fall lautet der fermionische Anteil der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_f(x) = \sum_{i=1}^{n_f} \bar{\psi}_i(x) \mathcal{D} \psi_i(x). \quad (3.1)$$

Aus der Identität

$$\{\mathcal{D}, \gamma_5\} = 0 \quad (3.2)$$

folgt, daß die Lagrangedichte in der Form

$$\mathcal{L}_f(x) = \sum_{i=1}^{n_f} \bar{\psi}_{R,i}(x) \mathcal{D} \psi_{R,i}(x) + \bar{\psi}_{L,i}(x) \mathcal{D} \psi_{L,i}(x) \quad (3.3)$$

mit den links- bzw. rechtshändigen Komponenten

$$\psi_{L,i}(x) = P_+ \psi_i(x), \quad \bar{\psi}_{L,i}(x) = \bar{\psi}_i(x) P_-, \quad (3.4)$$

$$\psi_{R,i}(x) = P_- \psi_i(x), \quad \bar{\psi}_{R,i}(x) = \bar{\psi}_i(x) P_+ \quad (3.5)$$

geschrieben werden kann; dabei ist $P_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5)$. Die Lagrangedichte ist invariant unter globalen (infinitesimalen) chiralen Transformationen

$$\delta \psi_L = \tau^a \psi_L, \quad \delta \bar{\psi}_L = -\bar{\psi}_L \tau^a, \quad (3.6)$$

$$\delta \psi_R = \tau^a \psi_R, \quad \delta \bar{\psi}_R = -\bar{\psi}_R \tau^a, \quad (3.7)$$

wobei τ^a ($a = 1 \dots n_f^2 - 1$) die Generatoren von $SU(n_f)$ sind, sowie unter den entsprechenden Flavour-Singulett-Transformationen, d. h. die Symmetriegruppe der klassischen Lagrangedichte der masselosen Theorie ist

$$\tilde{G} = SU(n_f)_L \times SU(n_f)_R \times U(1)_L \times U(1)_R. \quad (3.8)$$

Nach dem Noether-Theorem folgt aus der Invarianz der Theorie unter einer n -parametrischen Liegruppe die Existenz von n linear unabhängigen erhaltenen Strömen; für die Symmetriegruppe (3.8) sind dies die Vektorströme

$$V_\mu^a(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_\mu\tau^a\psi(x) \quad (3.9)$$

$$V_\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_\mu\psi(x) \quad (3.10)$$

sowie die Axialvektorströme

$$A_\mu^a(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_5\gamma_\mu\tau^a\psi(x) \quad (3.11)$$

$$A_\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_5\gamma_\mu\psi(x). \quad (3.12)$$

Der Vektorstrom bleibt auch dann noch erhalten, wenn der Lagrangedichte ein Massenterm

$$\mathcal{L}_m(x) = m \sum_{i=1}^{n_f} \bar{\psi}_i(x)\psi_i(x) \quad (3.13)$$

hinzugefügt wird; die Axialvektorströme sind nicht länger erhalten:

$$\partial_\mu A_\mu^a(x) = 2mP^a(x) \quad (3.14)$$

mit der pseudoskalaren Dichte

$$P^a(x) = \bar{\psi}(x)\tau^a\gamma_5\psi(x). \quad (3.15)$$

In der Quantenfeldtheorie folgen aus der Invarianz der Wirkung unter einer Symmetriegruppe *Wardidentitäten*:

Unter einer lokalen Transformation

$$\delta\psi(x) = \alpha(x)\tau^a\psi(x), \quad \delta\bar{\psi}(x) = -\alpha(x)\bar{\psi}(x)\tau^a \quad (3.16)$$

mit Transformationsparameter $\alpha(x)$, der außerhalb eines beschränkten Gebietes verschwindet, gilt für eine beliebige Observable O

$$\langle\delta O\rangle = -\left\langle O \left(\int d^4x \alpha(x) \partial_\mu V_\mu^a(x) \right) \right\rangle, \quad (3.17)$$

wobei δO die Variation von O unter der Transformation (3.16) ist. Die entsprechende Identität gilt auch für eine Singulett-Transformation. Unter einer lokalen axialen Transformation

$$\delta\psi(x) = \alpha(x)\tau^a\gamma_5\psi(x), \quad \delta\bar{\psi}(x) = \alpha(x)\bar{\psi}(x)\gamma_5\tau^a \quad (3.18)$$

gilt

$$\langle\delta O\rangle = \left\langle O \left(\int d^4x \alpha(x) \left(-\partial_\mu A_\mu^a(x) + 2mP^a(x) \right) \right) \right\rangle. \quad (3.19)$$

Die Wardidentität für eine axiale Singulett-Transformation

$$\delta\psi(x) = \alpha(x)\gamma_5\psi(x), \quad \delta\bar{\psi}(x) = \alpha(x)\bar{\psi}(x)\gamma_5 \quad (3.20)$$

ist hingegen *anomal*:

$$\langle \delta O \rangle = \left\langle O \left(\int d^4x (-\partial_\mu A_\mu(x) + 2mP(x) + 2n_f q(x)) \right) \right\rangle \quad (3.21)$$

mit der topologischen Ladungsdichte

$$q(x) = \frac{1}{32\pi^2} \text{tr} (\epsilon_{\alpha\beta\mu\nu} F_{\alpha\beta}(x) F_{\mu\nu}(x)). \quad (3.22)$$

In der Pfadintegralformulierung der Quantenfeldtheorie rührt die Anomalie daher, daß das Integrationsmaß $D\psi D\bar{\psi}$ nicht invariant unter der Transformation (3.20) ist [8, 9].

Die Auswirkungen der chiralen Symmetrie auf das Teilchenspektrum der QCD hängen nicht allein von der Symmetriegruppe G der Theorie ab; von Bedeutung ist auch, unter welcher Untergruppe H von G der QCD-Vakuumszustand invariant ist. Wir betrachten zunächst wieder den masselosen Fall, d.h.

$$G = SU(n_f)_L \times SU(n_f)_R \times U(1)_V. \quad (3.23)$$

Nach dem Vafa-Witten-Theorem [10] ist das Vakuum auf jeden Fall invariant unter der Untergruppe $SU(n_f)_V$ der vektorartigen Transformationen; bezüglich der Invarianz unter axialen Transformationen bestehen grundsätzlich die beiden folgenden Möglichkeiten:

- Der Vakuumszustand ist invariant unter der vollen Symmetriegruppe, d.h. $H = G$. In diesem Fall enthält das Teilchenspektrum der Theorie Multipletts von Teilchen, die unter irreduziblen Darstellungen von G transformieren. Insbesondere gibt es in jedem Multiplett Teilchen von entgegengesetzter Parität.
- Der Vakuumszustand ist nicht invariant unter axialen Transformationen, d. h. die Symmetriegruppe G ist spontan gebrochen zu $H = SU(n_f)_V \times U(1)_V$. Das Spektrum besteht aus Multipletts von Teilchen, die unter irreduziblen Darstellungen der Gruppe $SU(n_f)_V \times U(1)_V$ transformieren. Nach dem Goldstone-Theorem gibt es für jeden Generator der gebrochenen Symmetrie ein masseloses skalares Teilchen (Goldstone-Boson); für die Gruppe $SU(n_f)$ sind dies $n_f^2 - 1$ Teilchen.

In der Natur existieren keine masselosen Quarks; durch die Massenterme in der Lagrange-dichte wird die Symmetriegruppe (3.23) also explizit gebrochen. Da jedoch die Massen der Up- und Down-Quarks sehr klein sind, ist die $SU(2)$ -Symmetrie nur schwach gebrochen. In einem geringeren Maße gilt das auch für das Strange-Quark bzw. für die $SU(3)$ -Symmetrie. Experimentell beobachtet man, daß Mesonen und Baryonen in $SU(3)$ -Multipletts auftreten; das leichteste dieser Multipletts ist das Oktett der pseudoskalaren Mesonen (π, K, η). Multipletts mit Teilchen entgegengesetzter Parität wurden nicht beobachtet. Aus dieser Beobachtung folgert man, daß die zweite Möglichkeit realisiert ist: Die chirale Symmetrie ist spontan gebrochen, die pseudoskalaren Mesonen sind die Goldstone-Bosonen.

3.2 Diskretisierung

Es erwies sich als schwierig, eine Wirkung auf dem Gitter zu formulieren, die die korrekte Symmetriegruppe (3.23) besitzt und die im Kontinuumslimit in die Kontinuumswirkung übergeht. Ein naheliegender Ansatz besteht darin, den Kontinuums-Diracoperator $\mathcal{D} = \gamma_\mu \partial_\mu$ zu diskretisieren, indem der Ableitungsoperator ∂_μ durch einen Differenzoperator ersetzt wird. Verwendet man hierbei die symmetrische Differenz

$$\nabla_\mu f(x) = \frac{1}{2} (f(x + \hat{\mu}) - f(x - \hat{\mu})), \quad (3.24)$$

so erhält man den „naiven“ (freien) Diracoperator D_{naiv} , definiert durch

$$D_{\text{naiv}}\psi(x) = \frac{1}{2} \sum_\mu (\gamma_\mu \psi(x + \hat{\mu}) - \gamma_\mu \psi(x - \hat{\mu})). \quad (3.25)$$

Im Impulsraum hat der fouriertransformierte Operator die Form

$$\tilde{D}_{\text{naiv}}(p) = \sum_\mu \gamma_\mu \sin(ap_\mu). \quad (3.26)$$

Zwar geht $\tilde{D}_{\text{naiv}}(p)$ für $ap \ll 1$ in den Kontinuums-Ausdruck $\gamma_\mu p_\mu$ über, jedoch ist aus (3.26) ersichtlich, daß \tilde{D}_{naiv} 15 weitere Nullstellen ($(0, 0, 0, \pi/a), \dots, (\pi/a, \pi/a, \pi/a, \pi/a)$) in der Brillouinzone hat. Die mit dem naiven Diracoperator formulierte Wirkung beschreibt also 16 masselose „Flavours“ von Fermionen; dieses Phänomen ist als „Fermionenverdopplung“ bekannt.

Aus dem Nielsen-Ninomiya-Theorem [11, 12, 13] folgt, daß dieses Verhalten nicht etwa eine Besonderheit der „naiven“ Diskretisierung des Diracoperators, sondern unter gewissen Voraussetzungen unvermeidbar ist: Es ist nicht möglich, auf dem Gitter eine fermionische Wirkung der Form

$$S_f = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D(x-y) \psi(y) \quad (3.27)$$

mit einem Gitter-Diracoperator $D(x)$ zu konstruieren, der gleichzeitig folgende Bedingungen erfüllt[14]:

- (1) Der Operator D ist *lokal* im folgenden Sinne: Es gibt Konstanten C und r_{loc} , so daß gilt

$$|D(x)| \leq C e^{-|x|/r_{\text{loc}}}. \quad (3.28)$$

- (2) Der Diracoperator hat den richtigen Kontinuumslimit: für $|p| \ll \frac{\pi}{a}$ gilt

$$\tilde{D}(p) = i\gamma_\mu p_\mu + O(ap^2), \quad (3.29)$$

wobei $\tilde{D}(p)$ wieder der Fourier-transformierte Diracoperator ist.

- (3) Es gibt keine „Fermionenverdopplung“: Für $p \neq 0$ ist $\tilde{D}(p)$ invertierbar.

(4) Der Diracoperator erfüllt die Antikommutatorbeziehung

$$\{\gamma_5, D\} = 0. \quad (3.30)$$

Folglich muß in der Gitterformulierung der QCD eine der vier Eigenschaften aufgegeben werden. Da die ersten drei Eigenschaften zur Formulierung einer lokalen Feldtheorie unerlässlich sind, muß in der Gitterformulierung der QCD die Antikommutatorbeziehung (3.30) aufgegeben werden.

Bei *Wilson-Fermionen* wird der Diracoperator durch einen zusätzlichen Term („Wilson-Term“) ergänzt; dieser Term verschwindet im Kontinuumslimit, bricht bei endlichem Gitterabstand die chirale Symmetrie aber explizit. Der Wilson-Dirac-Operator ist definiert durch

$$D_W\psi(x) = (4 + m)\psi(x) + \frac{1}{2} \sum_{\mu} ((1 + \gamma_{\mu})\psi(x + \hat{\mu}) - (1 - \gamma_{\mu})\psi(x - \hat{\mu})). \quad (3.31)$$

Die explizite Brechung der chiralen Symmetrie durch den Wilson-Term führt zu einer Reihe von Problemen; z. B. muß die Quarkmasse additiv renormiert werden. Für numerische Simulationen besonders störend ist das Auftreten von „exzeptionellen“ Konfigurationen: Dies sind Eichfeldkonfigurationen, auf denen der massive Diracoperator negative Eigenwerte hat. Durch das Auftreten dieser Konfigurationen ist es mit Wilson-Fermionen nur schwer möglich, leichte Quarks zu simulieren.

Später wurde erkannt, daß das Bestehen von Gl. (3.30) nicht notwendig ist, um chirale Symmetrie auf dem Gitter zu formulieren: Es reicht aus, daß die Wirkung (im Falle von n_f masselosen Fermionen) unter der Gruppe $SU(n_f)_L \times SU(n_f)_R \times U(1)_V \times U(1)_A$ invariant ist, daß die $U(1)_A$ -Symmetrie anomal ist und daß die Transformationen, unter denen die Wirkung invariant ist, für $a \rightarrow 0$ in die Transformationen (3.4)-(3.7) übergehen. Dies läßt sich erreichen, wenn der Dirac-Operator die Ginsparg-Wilson-Gleichung[15]

$$\{D, \gamma_5\} = D\gamma_5D \quad (3.32)$$

erfüllt. In diesem Fall kann man wie folgt links- und rechtshändige Komponenten der Spinoren definieren:

$$\psi_L(x) = \hat{P}_+\psi(x) \quad (3.33)$$

$$\psi_R(x) = \hat{P}_-\psi(x) \quad (3.34)$$

$$\bar{\psi}_L(x) = \bar{\psi}(x)P_- \quad (3.35)$$

$$\bar{\psi}_R(x) = \bar{\psi}(x)P_+ \quad (3.36)$$

mit den Projektoren

$$P_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5) \quad (3.37)$$

$$\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\gamma}_5) \quad (3.38)$$

$$\hat{\gamma}_5 = \gamma_5(1 - D). \quad (3.39)$$

Aus der Ginsparg-Wilson-Beziehung folgt, daß die Wirkung invariant unter den chiralen Transformationen (3.6)-(3.7) ist.

Der massive Diracoperator ist durch

$$D_{m_q} = (1 - \frac{1}{2}m_q) D + m_q \quad (3.40)$$

mit der Quarkmasse m_q definiert[14]; diese Definition der Quarkmasse zeichnet sich dadurch aus, daß der Zusammenhang zwischen der nackten und der renormierten Quarkmasse linear wird (bis zur Ordnung $O(a)$)[16]. Der fermionische Anteil der Wirkung ist

$$S_f = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D_{m_q}(x,y) \psi(y). \quad (3.41)$$

Wie im Kontinuum folgen aus der Symmetrie der Wirkung Wardidentitäten. Zu ihrer Herleitung betrachten wir die Variation des Erwartungswertes $\langle O \rangle_F$ eines Operators O in einem vorgegebenen Eichfeld, wobei $\langle O \rangle_F$ für $\int D\Psi D\bar{\Psi} e^{-S(\psi, \bar{\psi})} O$ steht, unter einer lokalen Variation

$$\delta\psi(x) = \alpha(x)\tau^a\psi(x), \quad \delta\bar{\psi}(x) = -\alpha(x)\bar{\psi}(x)\tau^a \quad (3.42)$$

mit Variationsparameter $\alpha(x)$. Da das Integrationsmaß invariant unter (3.42) ist, gilt

$$0 = \delta\langle O \rangle_F = \langle \delta O \rangle_F - \langle O \delta S \rangle_F \quad (3.43)$$

Für die Variation der (masselosen) Wirkung $S = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D(x,y) \psi(y)$ erhalten wir

$$\delta S = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) \tau^a (-\alpha(x) D(x,y) + D(x,y) \alpha(y)) \psi(y). \quad (3.44)$$

Wie in [17] gezeigt, läßt sich (3.44) schreiben als

$$\delta S = \sum_x \nabla_\mu^v \alpha(x) \hat{V}_\mu(x) = - \sum_x \alpha(x) \nabla_\mu^r \hat{V}_\mu(x) \quad (3.45)$$

mit den Vorwärts- bzw. Rückwärtsableitungen $\nabla_\mu^v, \nabla_\mu^r$ sowie dem Strom

$$\hat{V}_\mu^a(x) = \sum_{y,z} \psi(y) \tau^a K_\mu(x; y, z) \psi(z), \quad (3.46)$$

wobei der Kern K durch

$$K_\mu(x; y, z) = -i \left. \frac{\partial D(U^{(\alpha)})(y, z)}{\partial \alpha_\mu(x)} \right|_{\alpha=0} \quad (3.47)$$

$$U_\mu^{(\alpha)}(x) = e^{i\alpha_\mu(x)} U_\mu(x) \quad (3.48)$$

definiert ist. Somit lautet die Wardidentität

$$\langle \delta O \rangle_F = - \sum_x \langle O \alpha(x) \nabla_\mu^r \hat{V}_\mu^a(x) \rangle_F. \quad (3.49)$$

Die (3.49) entsprechende Flavour-Singulett-Wardidentität gilt analog.

Für eine lokale axiale Transformation

$$\delta\psi(x) = \alpha(x)\tau^a(\hat{\gamma}_5\psi)(x), \quad \delta\bar{\psi}(x) = \alpha(x)\bar{\psi}(x)\gamma_5\tau^a \quad (3.50)$$

ist die Variation der Wirkung

$$\delta S = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x)\tau^a \left(\gamma_5\alpha(x)D(x,y) + \sum_z D(x,z)\hat{\gamma}_5(z,y)\alpha(z) \right) \psi(y) \quad (3.51)$$

$$= \sum_{x,y,z} \bar{\psi}(x)\tau^a (-\alpha(x)D(x,z) + D(x,z)\alpha(z)) \hat{\gamma}_5(z,y)\psi(y) \quad (3.52)$$

$$= -\sum_x \alpha(x)\nabla_\mu^r \hat{A}_\mu^a(x) \quad (3.53)$$

mit dem Axialvektorstrom

$$\hat{A}_\mu^a(x) = \sum_{y,z,w} \bar{\psi}(y)\tau^a K_\mu(y,z)\hat{\gamma}_5(z,w)\psi(w), \quad (3.54)$$

woraus sich die Wardidentität

$$\langle \delta O \rangle_F = -\sum_x \langle O\alpha(x)\nabla_\mu^r \hat{A}_\mu^a(x) \rangle_F \quad (3.55)$$

ergibt.

Im Falle einer axialen Flavour-Singulett-Variation

$$\delta\psi(x) = \alpha(x)(\hat{\gamma}_5\psi)(x), \quad \delta\bar{\psi}(x) = \alpha(x)\bar{\psi}(x)\gamma_5 \quad (3.56)$$

ist zu beachten, daß das Integrationsmaß $d\psi(x)$ im Funktionalintegral nicht invariant ist: Die Funktionaldeterminante der Transformation

$$\psi'(x) = ((1 + \alpha(x)\hat{\gamma}_5)\psi)(x) \quad (3.57)$$

ist [18, 17]

$$\frac{\partial\psi'(x)}{\partial\psi(x)} = 1 + 2n_f\alpha(x)q(x) \quad (3.58)$$

mit der durch

$$q(x) = \frac{1}{2}\text{tr}(\gamma_5 D(x,x)) \quad (3.59)$$

gegebenen Diskretisierung der topologischen Ladungsdichte. Somit lautet die Wardidentität

$$\langle \delta O \rangle_F = \sum_x \left\langle O\alpha(x) \left(-\nabla_\mu^r \hat{A}_\mu(x) + 2n_f q(x) \right) \right\rangle_F. \quad (3.60)$$

Da die in diesem Abschnitt besprochenen Wardidentitäten jeweils schon in einem vorgegebenen Eichfeld gelten, gelten sie auch in der Valenzquarknäherung.

3.3 Overlap-Operator

Es sind verschiedene Diracoperatoren bekannt, die die Ginsparg-Wilson-Beziehung (3.32) erfüllen und die es daher erlauben, Fermionen mit chiraler Symmetrie auf dem Gitter zu implementieren:

- Fixpunkt-Fermionen [20, 21, 22]: Es ist möglich, auf dem Gitter eine Wirkung zu konstruieren, die „klassisch perfekt“ ist, d.h. die keine Gitterartefakte in der klassischen Eichtheorie hat. Der Diracoperator dieser Wirkung ist als Lösung einer Fixpunktgleichung definiert. Während eine exakte Implementation dieses Diracoperators für numerische Simulationen aufgrund der großen Komplexität ungeeignet ist, sind Simulationen mit einem approximativen Fixpunktoperator möglich [23, 24]. Allerdings führt dies dazu, daß auch die chirale Symmetrie nur noch approximativ realisiert ist.
- Domain-Wall-Fermionen [25]: In dieser Formulierung werden die Fermionen auf einem fünfdimensionalen Gitter simuliert. Im Grenzfall unendlicher Gitterausdehnung in der fünften Richtung erhält man auf dem Rand des fünfdimensionalen Gitters eine Theorie, deren Diracoperator die Ginsparg-Wilson-Beziehung erfüllt; für endliche Gitter ist sie verletzt (um Terme, die exponentiell mit der Ausdehnung in der fünften Richtung verschwinden).
- Overlap-Fermionen [26]: Von Neuberger wurde eine explizite Konstruktion gefunden, die es ermöglicht, von einem beliebigen Diracoperator ausgehend einen Overlap-Operator zu konstruieren, der die Ginsparg-Wilson-Beziehung erfüllt. Diese Konstruktion werden wir im Folgenden beschreiben.

Sei $D_W(m)$ der Wilson-Dirac-Operator mit Masse m (3.31) und sei $H_W(m) = \gamma_5 D_W(m)$ (prinzipiell kann die folgende Konstruktion mit einem beliebigen Diracoperator D durchgeführt werden, der die Bedingung $\gamma_5 D \gamma_5 = D^\dagger$ erfüllt). Dann ist der Overlap-Dirac-Operator wie folgt definiert:

$$D_{\text{ov}} = 1 + \gamma_5 \text{sgn} H_W(-\rho) \quad (3.61)$$

mit einem Parameter $\rho \in [0, 2]$. Dabei ist die Vorzeichenfunktion in (3.61) über die Spektraldarstellung von H_W definiert: Seien u_i die normierten Eigenvektoren von H_W mit zugehörigen Eigenwerten λ_i ; dann ist

$$\text{sgn} H_W := \sum_i \text{sgn}(\lambda_i) u_i u_i^\dagger. \quad (3.62)$$

Diese Darstellung ist für eine numerische Behandlung ungeeignet; stattdessen approximiert man $\text{sgn}(H_W)$ in geeigneter Weise. Dies ist auf verschiedene Arten möglich; wir haben die Approximation durch Minmax-Polynome [27] benutzt, bei der die Vorzeichenfunktion $\text{sgn}(x)$ durch ein Polynom approximiert wird. Dabei wird zu einem gegebenen Approximationsfehler ϵ ein Polynom $p_\epsilon(x)$ konstruiert, so daß

$$\left| p_\epsilon(x) - \frac{1}{\sqrt{x}} \right| < \epsilon \quad \text{für} \quad x \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \quad (3.63)$$

gilt; dabei sind λ_{\min} und λ_{\max} der kleinste bzw. größte Eigenwert von H_W^2 . Die Konstruktion des Polynoms kann mit dem Algorithmus von Maehly [27] erfolgen. Damit gilt dann für einen beliebigen Vektor ψ

$$\left| \left(H_W p_\epsilon \left(H_W^2 \right) - \text{sgn} H_W \right) \psi \right| < \epsilon |\psi|. \quad (3.64)$$

Der Grad n des Polynoms p_ϵ hängt von ϵ sowie von der Konditionierungszahl

$$\kappa(H_W^2) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \quad (3.65)$$

von H_W^2 näherungsweise ab gemäß

$$n = b \sqrt{\kappa(H_W^2)} \log \left(\frac{A}{\epsilon} \right) \quad (3.66)$$

mit Konstanten $A = 0.41$ und $b = 0.48$ [27].

Der numerische Aufwand ist also proportional zur Wurzel aus der Konditionierungszahl von H_W^2 auf einer gegebenen Eichkonfiguration. Das Spektrum von $H_W(-\rho)^2$ ist nach oben beschränkt durch

$$\lambda_{\max} \leq \left(\frac{8 - \rho}{4 - \rho} \right)^2, \quad (3.67)$$

allerdings kann der kleinste Eigenwert λ_{\min} beliebig nahe bei Null liegen, d. h. es gibt Eichfeldkonfigurationen, auf denen der Polynomgrad zu einem gegebenen Fehler ϵ beliebig groß wird. Dies läßt sich verhindern, indem einige kleine Eigenwerte von H_W und die zugehörigen Eigenvektoren berechnet werden und die Vorzeichenfunktion auf dem von diesen Eigenvektoren aufgespannten Teilraum exakt (gemäß(3.62)) behandelt wird; insgesamt gilt dann die Darstellung

$$\text{sgn} H_W = \sum_{i=1}^{n_e} \text{sgn}(\lambda_i) u_i u_i^\dagger + P^\perp H_W p_\epsilon(H_W^2), \quad (3.68)$$

wobei n_e die Zahl der exakt behandelten Eigenvektoren ist und

$$P^\perp = 1 - \sum_{i=1}^{n_e} u_i u_i^\dagger \quad (3.69)$$

der Projektor auf den zu den berechneten Eigenvektoren orthogonalen Teilraum ist. Der Polynomgrad ist somit proportional zur Konditionierungszahl von H_W^2 auf dem zu $\langle u_1 \dots u_{n_e} \rangle$ orthogonalen Teilraum, also um einen Faktor λ_{n_e}/λ_1 kleiner als der Polynomgrad, der ohne Eigenvektorprojektion nötig wäre. In Abb. 3.1 haben wir das Verhältnis $|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}|$ in Abhängigkeit von i dargestellt. Aus der Abbildung ist ersichtlich, daß das Verhältnis $|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}|$ für größere i nur noch langsam wächst. Wir haben in unseren Simulationen bei $\beta = 8.45, V = 24^3 48, \rho = 1.4$ den Wert $n_e = 50$ benutzt. Damit verringert sich der Polynomgrad ungefähr um den Faktor sieben.

Die Konditionierungszahl $\kappa(H_W)$ hängt sowohl von der Eichfeldwirkung als auch von dem Parameter ρ ab. In Abb. 3.2 ist $\kappa(H_W)$ für verschiedene Werte von ρ dargestellt; dabei vergleichen wir die Wilson-Eichfeldwirkung mit der Lüscher-Weisz-Wirkung.

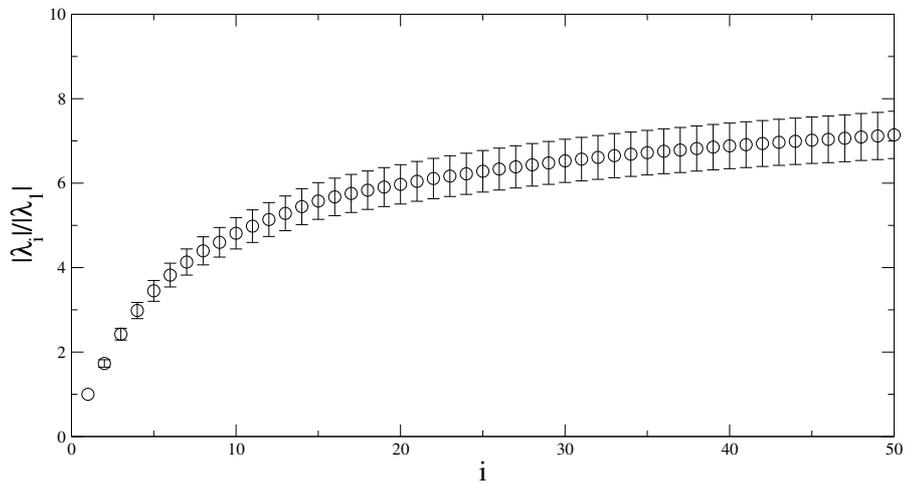


Abbildung 3.1: Das Verhältnis $|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}|$ der Eigenwerte des hermiteschen Wilson-Operators ($\beta = 8.45, \rho = 1.4, V = 24^3 48$)

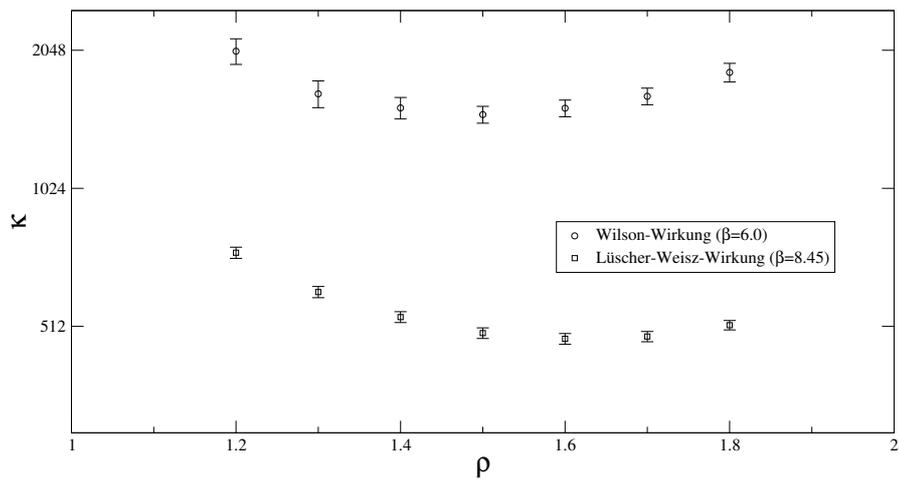


Abbildung 3.2: Konditionszahl $\kappa(H_W(-\rho))$ des hermiteschen Wilson-Operators in Abhängigkeit von ρ ($V = 16^3 32$).

3.3.1 Lokalität

Operatoren wie der Wilson-Diracoperator (3.31) sind *ultralokal*, d. h. sie koppeln nur Gitterplätze bis zu einem Maximalabstand r_{\max} . Es läßt sich zeigen [28, 29], daß diese Eigenschaft mit der Ginsparg-Wilson-Beziehung (3.32) unvereinbar ist.

Um im Kontinuumsimes einen lokalen Operator zu erhalten, reicht es aus, daß der Gitteroperator lokal im Sinne von Gl. (3.28) ist, falls der „Lokalisierungsradius“ r_{loc} in (3.28) im Kontinuumsimes gegen Null geht. Für den freien Overlapoperator läßt sich zeigen [30], daß Gl. (3.28) erfüllt ist; im allgemeinen Fall hängen die Lokalisierungseigenschaften des Diracoperators von der Eichfeldwirkung ab. Da der hermitesche Wilson-Operator H_W Eigenwerte haben kann, die beliebig nahe bei Null liegen, ist es nicht möglich, das Bestehen der Beziehung (3.28) für generelle Eichfelder zu beweisen; stattdessen folgen wir [30] und untersuchen die Lokalitätseigenschaften des Overlapoperators auf Eichfeldkonfigurationen, die mit der Lüscher-Weisz-Wirkung erzeugt wurden.

Dazu betrachten wir die Größe

$$f_n(r) = \left\langle \left\langle \max_x |D(x, y)| \Big|_{\|x-y\|_n=r} \right\rangle_y \right\rangle_U \quad (3.70)$$

mit der n -Norm

$$\|x\|_n = \left(\sum_{\mu=1}^4 |x_\mu|^n \right)^{1/n}, \quad (3.71)$$

wobei wir $n = 1$ und $n = 2$ betrachten.

In Abb. 3.3 ist $f_1(r)$ für verschiedene Werte von ρ dargestellt. In allen Fällen fällt $f_1(r)$ exponentiell ab; die Rate des Abfallens hängt von ρ ab. In Abb. 3.4 vergleichen wir die Lokalisierungsradien in der 1-Norm, die wir durch einen Fit an Gl. (3.28) bestimmt haben, für verschiedene Werte von ρ für die Wilson- und die Lüscher-Weisz-Wirkung.

Um den Lokalisierungsradius mit den Korrelationslängen der Operatoren, die Hadronzustände erzeugen bzw. vernichten, zu vergleichen zu können, haben wir in Abb. 3.5 die Funktion $f_2(r)$ dargestellt; aus Gründen der Übersichtlichkeit beschränken wir uns auf $\rho = 1.4$. In Abb. 3.6 ist der Lokalisierungsradius in der 2-Norm dargestellt.

Bei der endgültigen Wahl von ρ für die Simulationen ist zu beachten, daß einerseits die sich ergebende Konditionierungszahl des Wilson-Diracoperators möglichst klein sein sollte, andererseits sollte auch der Lokalisierungsradius möglichst klein sein. Aus den Abbildungen 3.2 und 3.4 ist ersichtlich, daß die beiden Größen bei verschiedenen Werten von ρ ihre Minima annehmen. Wir haben für unsere Simulationen mit der Lüscher-Weisz-Wirkung (bei $\beta = 8.45$) $\rho = 1.4$ gesetzt.

3.4 Chirale Störungstheorie

Spontane Brechung der chiralen Symmetrie hat nicht nur die Existenz der Goldstone-Bosonen zur Folge, sondern legt auch die Wechselwirkungen dieser Teilchen bei kleinen Wechselwirkungsenergien fest. Eine systematische Beschreibung der Wechselwirkungen der

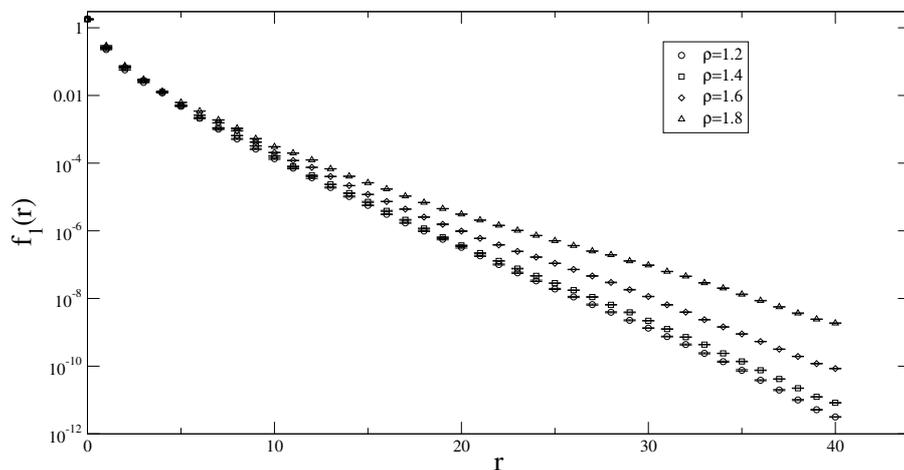


Abbildung 3.3: Lokalität des Diracoperators (Lüscher-Weisz-Wirkung, $\beta=8.45$) bezüglich der 1-Norm (Gl. (3.70)).

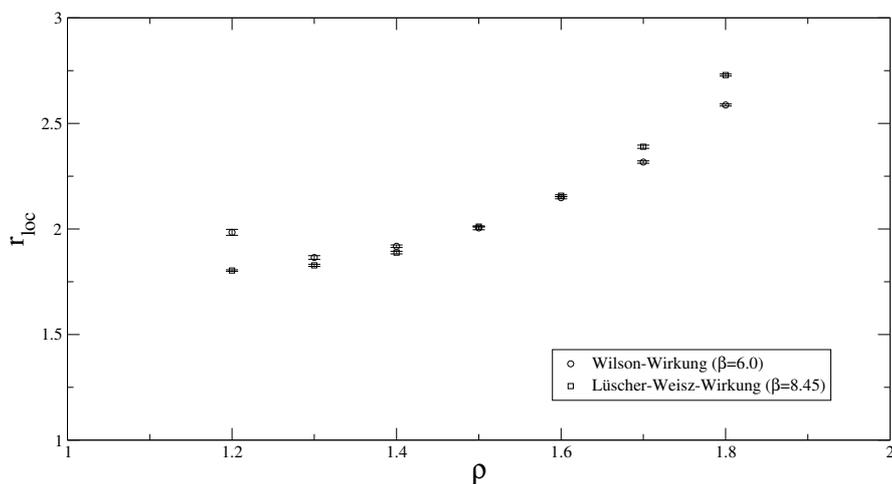


Abbildung 3.4: Lokalisierungsradius des Diracoperators in der 1-Norm.

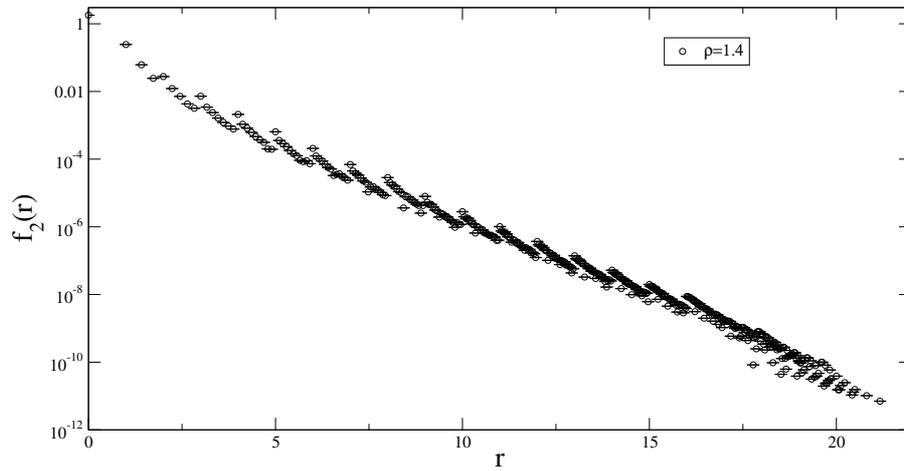


Abbildung 3.5: Lokalität des Diracoperators (Lüscher-Weisz-Wirkung, $\beta = 8.45$) bezüglich der 2-Norm (Gl. (3.70)).

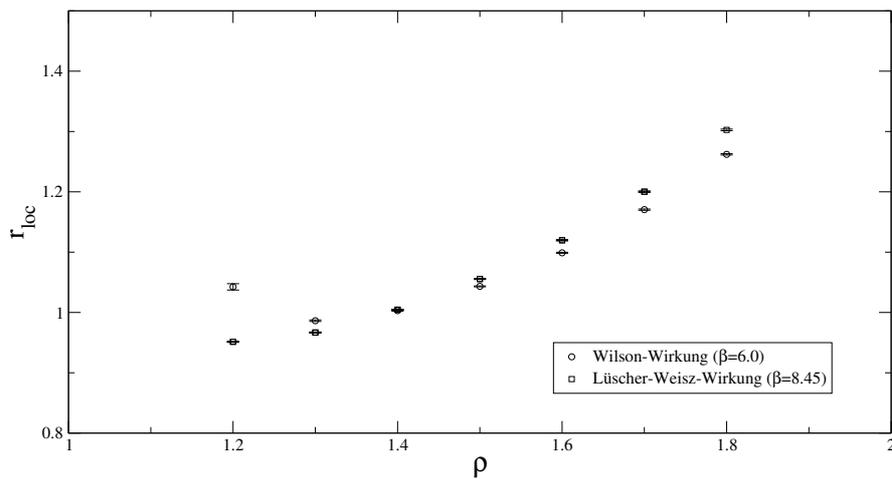


Abbildung 3.6: Lokalisierungsradius des Diracoperators in der 2-Norm.

Goldstone- Bosonen liefert die *chirale Störungstheorie*. Die Freiheitsgrade der Theorie werden dabei in einem Feld

$$U(x) = e^{\frac{i\phi(x)}{f}} \in SU(3) \quad (3.72)$$

mit einer Konstanten f zusammengefaßt. Die effektive Lagrangedichte enthält alle Terme, die invariant unter der Transformation

$$U(x) \rightarrow gU(x)h^\dagger \quad (3.73)$$

mit $g, h \in SU(3)$ sind; diese (unendlich vielen) Terme können nach Potenzen von p (entsprechend der Zahl der Ableitungen) geordnet werden. Der expliziten Brechung der chiralen Symmetrie durch die Quarkmassen wird dadurch Rechnung getragen, daß die Matrix \mathcal{M} der Quarkmassen in die Lagrangedichte einbezogen wird. In niedrigster Ordnung (p^2) lautet die Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(x) = \frac{1}{4}f^2\text{tr}(\partial_\mu U^\dagger \partial^\mu U) + \Sigma \text{tr}(\mathcal{M}U(x) + \mathcal{M}^\dagger U^\dagger(x)) \quad (3.74)$$

mit den beiden Konstanten f und Σ , die im chiralen Limes der Pion-Zerfallskonstanten bzw. dem chiralen Kondensat entsprechen.

In höheren Ordnungen wächst die Zahl der unabhängigen Terme in der Lagrangedichte, und damit die Zahl der unabhängigen Kopplungskonstanten, rasch an.

Auch für die Valenzquarknäherung der Quantenchromodynamik läßt sich eine chirale Störungstheorie entwickeln. Dies geschieht entweder in der „supersymmetrischen Methode“ [31, 32, 33], bei der zu jedem Quark ein entsprechendes „Geistquark“ eingeführt wird, das der Bose-Statistik gehorcht und welches die Effekte des dynamischen See-Quarks eliminiert, oder in der „Replika-Methode“ [34], bei der die Anzahl n_f der Quarkflavours in der Theorie als eine reelle Zahl aufgefaßt wird, so daß eine Extrapolation zu $n_f = 0$ durchgeführt werden kann.

In der Valenzquarknäherung bleibt das Flavoursingulett-Feld im chiralen Limes nicht massiv, so daß das entsprechende Teilchen nicht von den übrigen pseudoskalaren Mesonen entkoppelt; dies hat zur Folge, daß in der Lagrangedichte in niedrigster Ordnung die beiden weiteren Konstanten α_Φ und m_0 auftreten. Dadurch, daß die Größe dieser beiden Konstanten nicht kontrolliert werden kann, stellt die chirale Störungstheorie für die Valenzquarknäherung jedoch keine Störungstheorie im üblichen Sinne dar.

Anstelle von m_0 wird oft die dimensionslose Konstante

$$\delta = \frac{m_0^2}{48\pi^2 f^2} \quad (3.75)$$

benutzt.

Im Rahmen der chiralen Störungstheorie ist es auf einfache Weise möglich, die Effekte endlichen Volumens zu berücksichtigen. Wie von Gasser und Leutwyler gezeigt wurde [35], hängen die Kopplungskonstanten in der effektiven Lagrangedichte nicht vom Volumen ab; die Volumenabhängigkeit kommt dadurch zustande, daß die in der Störungsreihe auftretenden Integrale im Impulsraum durch Summen über die im endlichen Volumen erlaubten

Impulse ersetzt werden. Da wir sie später benötigen werden, geben wir hier die Formeln für den Propagator am Ursprung an:

$$G_{V=\infty}(M^2) = \int d^4p \frac{1}{p^2 + M^2} \quad (3.76)$$

$$G_V(M^2) = \sum_p \frac{1}{p^2 + M^2}, \quad (3.77)$$

wobei die Summe über alle Impulse der Form

$$p = \left(\frac{2\pi}{L_1}n_1, \frac{2\pi}{L_2}n_2, \frac{2\pi}{L_3}n_3, \frac{2\pi}{L_4}n_4 \right) \quad (3.78)$$

mit $n_i \in \mathbb{N}$ läuft (L_i bezeichnet die Gitterausdehnung in i -Richtung) und die Ausdrücke (3.76) und (3.77) noch der Regularisierung bedürfen. In dimensionaler Regularisierung gilt[36]

$$G_V(M^2) = G_{V=\infty}(M^2) + g_1(M^2, L_i) \quad (3.79)$$

mit dem Propagator im unendlichen Volumen

$$G_{V=\infty}(M^2) = \frac{M^2}{16\pi^2} \log \frac{M^2}{\Lambda_\chi^2} \quad (3.80)$$

und einer Funktion $g_1(M^2, L_i)$, die exponentiell mit ML verschwindet. Als Cutoff-Parameter haben wir $\Lambda_\chi = 1$ GeV verwendet.

Es müssen zwei Fälle unterschieden werden[37]:

- Für $ML_i \gg 1$ stellt die Funktion g_1 in (3.79) eine kleine Korrektur dar, qualitativ stimmen die Ergebnisse mit denen im unendlichen Volumen überein („p-Entwicklung“).
- Für $ML_i \rightarrow 0$ divergiert die Funktion g_1 ; dies rührt von den Term $p = 0$ in (3.77) her. Eine Lösung dieses Problems besteht darin, die Nullmoden in (3.77) exakt zu behandeln und die anderen Moden störungstheoretisch zu entwickeln („ ϵ -Entwicklung“)[37].

