

Kapitel 4

Algorithmen

4.1 Korrelationsfunktionen

Observablen wie Hadronmassen und -matrixelemente lassen sich aus Korrelationsfunktionen zusammengesetzter Operatoren bestimmen. Für die in dieser Arbeit betrachteten Observablen benötigen wir Zwei- und Dreipunktfunktionen.

Der Erwartungswert $\langle O \rangle$ einer Observablen O ist gegeben durch [38]

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int DUD\psi D\bar{\psi} e^{-S(U,\psi,\bar{\psi})} O(U,\psi,\bar{\psi}) \quad (4.1)$$

mit

$$Z = \int DUD\psi D\bar{\psi} e^{-S(U,\psi,\bar{\psi})}. \quad (4.2)$$

Die Observablen, die wir benötigen, sind von der Form

$$O(U,\psi,\bar{\psi}) = \psi_{i_1} \bar{\psi}_{j_1} \dots \psi_{i_n} \bar{\psi}_{j_n} A(U), \quad (4.3)$$

wobei die Indizes sowohl die Ortskoordinate als auch interne Freiheitsgrade bezeichnen. Die fermionischen Integrale lassen sich analytisch ausführen mit dem Ergebnis

$$\langle \psi_{i_1} \bar{\psi}_{j_1} \dots \psi_{i_n} \bar{\psi}_{j_n} A(U) \rangle = \left\langle A(U) \sum_{k_1 \dots k_n} \epsilon_{j_1 \dots j_n}^{k_1 \dots k_n} G(U; m_q)_{i_1 k_1} \dots G(U; m_q)_{i_n k_n} \right\rangle_U. \quad (4.4)$$

Dabei bezeichnet $\langle \cdot \rangle_U$ die Mittelung über die Eichkonfigurationen:

$$\langle O(U) \rangle_U = \frac{1}{Z} \int DUD\psi D\bar{\psi} O(U) e^{-S_{\text{eff}}(U)}, \quad (4.5)$$

und $\epsilon_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_n}$ ist definiert durch

$$\epsilon_{j_1 \dots j_n}^{i_1 \dots i_n} = \begin{cases} 1 & \text{falls } (j_1 \dots j_n) \text{ eine gerade Permutation von } (i_1 \dots i_n) \text{ ist} \\ -1 & \text{falls } (j_1 \dots j_n) \text{ eine ungerade Permutation von } (i_1 \dots i_n) \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.6)$$

Der Quarkpropagator $G(U)$ ist auf einer Eichfeldkonfiguration definiert durch

$$G(U)D(U) = 1. \quad (4.7)$$

Der Zusammenhang zwischen den in der Gittereichtheorie gemessenen Korrelationsfunktionen und physikalischen Observablen wie Hadronmassen, Zerfallskonstanten oder Matrixelementen wird durch den Transfermatrixformalismus hergestellt. Jeder aus den Quark- und Eichfeldern zusammengesetzten Observablen O entspricht ein Operator \hat{O} auf dem Hilbertraum \mathcal{H} der Theorie. Die Transfermatrix \hat{T} ist ein positiv definit, selbstadjungierter Operator auf \mathcal{H} , dessen Eigenwerte λ_i mit den Energien E_i der entsprechenden Zustände $|i\rangle$ über $\lambda_i = e^{-E_i}$ zusammenhängen.

Der Zusammenhang zwischen einer Korrelationsfunktion

$$C(t_1, \dots, t_n) = \langle O_1(t_1)O_2(t_2)\dots O_n(t_n) \rangle \quad (4.8)$$

und Matrixelementen der Operatoren \hat{O}_i ist gegeben durch

$$C(t_1, \dots, t_n) = \frac{1}{Z} \text{tr}(\hat{T}^{t_1} \hat{O}_1 \hat{T}^{t_2-t_1} \hat{O}_2 \dots \hat{O}_n \hat{T}^{N_T-t_n}) \quad (4.9)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{i_1, \dots, i_n} (\langle i_1 | i_1 \rangle \dots \langle i_n | i_n \rangle)^{-1} \cdot \langle i_1 | \hat{T}^{t_1+N_T-t_n} \hat{O}_1 | i_2 \rangle \langle i_2 | \hat{T}^{t_2-t_1} \hat{O}_2 | i_3 \rangle \dots \langle i_n | \hat{T}^{t_n-t_{n-1}} \hat{O}_n | i_1 \rangle \quad (4.10)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{i_1, \dots, i_n} e^{-E_{i_1}(t_1+N_T-t_n)-E_{i_2}(t_2-t_1)-\dots-E_{i_n}(t_n-t_{n-1})} \cdot (\langle i_1 | i_1 \rangle \dots \langle i_n | i_n \rangle)^{-1} \cdot \langle i_1 | \hat{O}_1 | i_2 \rangle \langle i_2 | \hat{O}_2 | i_3 \rangle \dots \langle i_n | \hat{O}_n | i_1 \rangle \quad (4.11)$$

mit der Partitionsfunktion

$$Z = \text{tr} \hat{T}^{N_T}. \quad (4.12)$$

Für den Fall, daß alle „Abstände“ $t_{i+1} - t_i$ zwischen zwei Operatoren \hat{O}_i und \hat{O}_{i+1} groß werden, werden die Summen über die Zustände in (4.11) von den Zuständen niedrigster Energie dominiert.

Die Konstruktion eines Hilbertraumes mit einer positiven, selbstadjungierten Transfermatrix ist nur für bestimmte Gitterwirkungen möglich, z.B. für die Kombination aus (dynamischen) Wilson-Fermionen und Wilson-Eichfeldwirkung [39]. Für reine Eichtheorie mit der Lüscher-Weisz-Eichfeldwirkung kann eine Transfermatrix in einem Hilbertraum konstruiert werden[40]; diese Transfermatrix ist jedoch nicht selbstadjungiert. Störungstheoretische Untersuchungen[40] deuten darauf hin, daß alle Eigenwerte λ der Transfermatrix mit $\lambda > \epsilon \lambda_{\max}$ reell und positiv sind (dabei ist λ_{\max} der größte Eigenwert der Transfermatrix und ϵ eine vom Cutoff unabhängige Konstante mit $0 < \epsilon < 1$).

Für die Valenzquarknäherung ist es nicht möglich, eine positive selbstadjungierte Transfermatrix zu konstruieren. Auch für die volle Theorie mit dynamischen Overlap-Fermionen ist keine Konstruktion einer solchen Transfermatrix bekannt. Wir werden dennoch Gleichungen (4.9)-(4.11) benutzen, um Hadronmassen sowie hadronische Matrixelemente zu bestimmen, und in der Notation nicht mehr zwischen einer Observablen O und dem entsprechenden Operator \hat{O} unterscheiden.

4.1.1 $O(a)$ -Verbesserung

Für Overlap-Fermionen ist es auf einfache Weise möglich, Diskretisierungsfehler der Ordnung $O(a)$ in Korrelationsfunktionen zu eliminieren[16]: Dazu muß lediglich der Propagator G durch den „verbesserten“ Propagator

$$\tilde{G} = (1 - \frac{1}{2}D)G \quad (4.13)$$

ersetzt werden; anders als bei Diskretisierungen, die die chirale Symmetrie brechen, ist es nicht erforderlich, Verbesserungskoeffizienten zu berechnen. Wir werden im Folgenden immer den $O(a)$ -verbesserten Propagator (4.13) verwenden, ohne dies besonders zu kennzeichnen.

4.1.2 Zweipunktfunktionen

Massen und Zerfallskonstanten der Mesonen lassen sich aus Zweipunktfunktionen

$$C_{M_2}(F_1, \Gamma_1, F_2, \Gamma_2, \vec{p}, t) = \langle O_{F_1, \Gamma_1}(\vec{p}, t) O_{F_2, \Gamma_2}(\vec{p}, 0) \rangle \quad (4.14)$$

mit Operatoren

$$O_{F, \Gamma}(\vec{p}, t) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \bar{\psi}(\vec{x}, t) F \Gamma \psi(\vec{x}, t) \quad (4.15)$$

bestimmen; dabei ist Γ eine Matrix im Spinorraum, F eine Matrix im Flavourraum. Durch Ausintegrieren der Fermionen im Pfadintegral erhält man (unter Ausnutzung von Translationsinvarianz)

$$\begin{aligned} & C_{M_2}(F_1, \Gamma_1, F_2, \Gamma_2, \vec{p}, t) \\ &= \sum_{\substack{\vec{x} \\ x=(t, \vec{x})}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \left(-\text{tr}(F_1 F_2) \langle \text{tr}(\Gamma_1 G(x, 0) \Gamma_2 G(0, x)) \rangle_U \right. \\ & \left. + \text{tr}(F_1) \text{tr}(F_2) \langle \text{tr}(\Gamma_1 G(x, x)) \text{tr}(\Gamma_2 G(0, 0)) \rangle_U \right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Der erste Term in Gl. (4.16) ist (Quarklinien-) „zusammenhängend“; er läßt sich mit Hilfe der Identität $G(x, y) = \gamma_5 G(y, x)^\dagger \gamma_5$ auf die Form

$$\sum_{\substack{\vec{x} \\ x=(t, \vec{x})}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \left(-\text{tr}(F_1 F_2) \left\langle \text{tr}(\Gamma_1 G(x, 0) \Gamma_2 \gamma_5 G(x, 0)^\dagger \gamma_5) \right\rangle_U \right) \quad (4.17)$$

bringen. Zu seiner Berechnung wird folglich der Quarkpropagator $G(x, 0)$ vom Punkt 0 zu allen anderen Gitterpunkten benötigt; wir erhalten ihn durch das Lösen eines linearen Gleichungssystems

$$D(z, x)G(x, 0) = \delta(z, 0). \quad (4.18)$$

Der zweite Term in (4.16) ist der (Quark-Linien-) „unzusammenhängende“ Anteil. Seine Berechnung gemäß Gl. (4.16) erfordert das Lösen eines linearen Gleichungssystems für jeden Gitterpunkt, was einen hohen numerischen Aufwand bedeutet. Auch wenn es Methoden gibt, mit denen der Rechenaufwand verringert werden kann[41], bleibt die Berechnung

unzusammenhängender Diagramme aufwendig.

Falls jedoch $\text{tr}(F_1) = 0$ oder $\text{tr}(F_2) = 0$ gilt, entfällt der unzusammenhängende Anteil. Wir werden nur Flavour-Nichtsingulett-Mesonen betrachten und benötigen demzufolge nur Zweipunktfunktionen der Art

$$C_{M_2}(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) := C_{M_2}(\tau^+, \Gamma_1, \tau^-, \Gamma_2, \vec{p}, t) \quad (4.19)$$

mit $\tau^\pm = \tau^1 \pm i\tau^2$.

Das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktion für $0 \ll t \ll N_T$ erhalten wir aus dem Transfermatrixformalismus:

$$C_{M_2}(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) = \langle O_{\Gamma_1}(\vec{p}, t) O_{\Gamma_2}(\vec{p}, 0) \rangle \quad (4.20)$$

$$\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \langle 0 | O_{\Gamma_1}(\vec{p}, t) | X \rangle \langle X | O_{\Gamma_2}(\vec{p}, 0) | 0 \rangle e^{-m_X t} \quad (4.21)$$

$$+ \sigma_1 \sigma_2 \langle 0 | O_{\Gamma_1}(\vec{p}, t) | X \rangle \langle X | O_{\Gamma_2}(\vec{p}, 0) | 0 \rangle e^{-m_X(N_T - t)} \quad (4.22)$$

$$= \begin{cases} A_{M_2}(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}) e^{-m_X N_T/2} \cosh(m_X(N_T/2 - t)) & \text{falls } \sigma_1 \sigma_2 = 1 \\ A_{M_2}(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}) e^{-m_X N_T/2} \sinh(m_X(N_T/2 - t)) & \text{falls } \sigma_1 \sigma_2 = -1. \end{cases} \quad (4.23)$$

Dabei ist $|X\rangle$ der Zustand niedrigster Energie, den der Operator O erzeugt, m_X die Masse dieses Zustandes und σ_1, σ_2 sind durch

$$\gamma_4 \Gamma_i \gamma_4 = \sigma_i \Gamma_i \quad (4.24)$$

definiert.

Für baryonische Korrelationsfunktionen benötigen wir Operatoren, die Baryonzustände erzeugen bzw. vernichten. Wir haben für das Proton den Operator

$$B_\alpha(\vec{p}, t) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \epsilon_{ijk} u_\alpha^i(t, \vec{x}) u_\beta^j(t, \vec{x}) (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} d_\gamma^k(t, \vec{x}) \quad (4.25)$$

und für das Antiproton entsprechend

$$\bar{B}_\alpha(\vec{p}, t) = \sum_{\vec{x}} e^{i\vec{p}\vec{x}} \epsilon_{ijk} \bar{d}_\beta^i(t, \vec{x}) (\gamma_5 C)_{\beta\gamma} \bar{u}_\gamma^j(t, \vec{x}) \bar{u}_\alpha^k(t, \vec{x}) \quad (4.26)$$

verwendet (dabei stehen lateinische Buchstaben für Farbindizes, griechische Buchstaben für Spinorindizes). Die Matrix C der Ladungskonjugation ist durch $C\gamma_\mu^T C^{-1} = -\gamma_\mu$ definiert. Für die Zweipunktfunktion erhalten wir hier nach Ausführen der Wick-Kontraktionen

$$\begin{aligned} C_{B_2}(\Gamma, t, \vec{p}) &= \Gamma_{\alpha\alpha'} \langle B_\alpha(\vec{p}, t) \bar{B}_{\alpha'}(\vec{p}, 0) \rangle \\ &= \sum_{\substack{\vec{x} \\ x=(t, \vec{x})}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \Gamma_{\alpha\alpha'} \epsilon_{ijk} \epsilon_{i'j'k'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} \cdot \\ &\quad \left\langle \left(G_{\gamma\beta'}^{ki'}(x, 0) \left(-G_{\alpha\gamma'}^{ij'}(x, 0) G_{\beta\alpha'}^{jk'}(x, 0) + G_{\alpha\alpha'}^{ik'}(x, 0) G_{\beta\gamma'}^{jj'}(x, 0) \right) \right) \right\rangle_U \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\substack{\vec{x} \\ x=(t, \vec{x})}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \epsilon_{ijk} \epsilon_{i'j'k'} \left[\Gamma_{\alpha\alpha'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} + \Gamma_{\alpha\gamma'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\alpha'} \right] \cdot \\ &\quad \left\langle \left(G_{\gamma\beta'}^{ki'}(x, 0) G_{\alpha\alpha'}^{ik'}(x, 0) G_{\beta\gamma'}^{jj'}(x, 0) \right) \right\rangle_U. \end{aligned} \quad (4.28)$$

In dieser Korrelationsfunktion tritt kein unzusammenhängender Term auf.

Für $0 \ll t \ll N_T$ wird die Korrelationsfunktion vom Proton-Grundzustand dominiert. Zu beachten ist dabei, daß der Operator (4.25) an Zustände positiver wie auch negativer Parität koppeln kann. Für $\vec{p} = 0$ können die Beiträge des Protons und des niedrigsten Zustandes negativer Parität (welchen wir hier mit p^* bezeichnen) unter Benutzung der Matrix

$$\Gamma_4 = \frac{1}{2}(1 + \gamma_4) \quad (4.29)$$

separiert werden:

$$C_{B_2}(\Gamma_4, t, \vec{p} = 0) = Z_p e^{-m_p t} + Z_{p^*} e^{-m_{p^*}(N_t - t)} \quad (4.30)$$

mit Konstanten Z_p, Z_{p^*} , die über

$$\langle 0 | B_\alpha | p(\vec{p}, s) \rangle = \sqrt{Z_p} u_{m_p, \alpha}(p, s) \quad (4.31)$$

$$\langle 0 | B_\alpha | p^*(\vec{p}, s) \rangle = \sqrt{Z_{p^*}} u_{m_{p^*}, \alpha}(p, s) \quad (4.32)$$

definiert sind, wobei wir mit $u_{m, \alpha}(p, s)$ die Lösung der freien Diracgleichung mit Masse m , Impuls p und Spin s bezeichnen[42].

4.1.3 Dreipunktfunktionen

Die Bestimmung von Proton-Matrixelementen erfordert die Berechnung von Dreipunkt-Funktionen der Art

$$C_{B_3}(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) = \Gamma_{\alpha\alpha'} \langle B_\alpha(\vec{p}, t) O(\tau) \bar{B}_{\alpha'}(\vec{p}, 0) \rangle \quad (4.33)$$

mit einer Polarisationsmatrix Γ sowie einem Operator $O(\tau)$, der die allgemeine Form

$$O(\tau) = \sum_{z, z', l, m} \left(O_{\mu\nu}^{(u)lm}(\tau; z, z') \bar{u}_\mu^l(z) u_\nu^m(z') + O_{\mu\nu}^{(d)lm}(\tau; z, z') \bar{d}_\mu^l(z) d_\nu^m(z') \right) \quad (4.34)$$

hat. Ausführen der Wick-Kontraktionen liefert (wobei wir in den folgenden Formeln die Abkürzung $x = (t, \vec{x})$ verwenden):

$$\begin{aligned} C_{B_3}(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) &= \Gamma_{\alpha\alpha'} \epsilon_{ijk} \epsilon_{i'j'k'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} \\ &\quad \sum_{\vec{x}, z, z'} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \left(O_{\mu\nu}^{(u)lm}(\tau; z, z') \langle u_\alpha^i(x) u_\beta^j(x) d_\gamma^k(x) \bar{u}_\mu^l(z) u_\nu^m(z') \bar{d}_{\beta'}^{j'}(0) \bar{u}_{\gamma'}^{j'}(0) \bar{u}_{\alpha'}^{k'}(0) \rangle \right. \\ &\quad \left. + O_{\mu\nu}^{(d)lm}(\tau; z, z') \langle u_\alpha^i(x) u_\beta^j(x) d_\gamma^k(x) \bar{d}_\mu^l(z) d_\nu^m(z') \bar{d}_{\beta'}^{j'}(0) \bar{u}_{\gamma'}^{j'}(0) \bar{u}_{\alpha'}^{k'}(0) \rangle \right) \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$= C_{B_3}^z(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) + C_{B_3}^u(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) \quad (4.36)$$

mit dem zusammenhängenden Anteil

$$\begin{aligned} C_{B_3}^z(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) &= \epsilon_{ijk} \epsilon_{i'j'k'} \Gamma_{\alpha\alpha'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} \sum_{\vec{x}, z, z'} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \left\langle O_{\mu\nu}^{(u)lm}(\tau; z, z') \right. \\ &\quad G_{\gamma\beta'}^{ki'}(x, 0) \left(G_{\alpha\mu}^{il}(x, z) G_{\beta\gamma'}^{jj'}(x, 0) G_{\nu\alpha'}^{mk'}(z', 0) - G_{\alpha\mu}^{il}(x, z) G_{\beta\alpha'}^{jk'}(x, 0) G_{\nu\gamma'}^{mj'}(z', 0) \right. \\ &\quad \left. - G_{\beta\mu}^{jl}(x, z) G_{\alpha\gamma'}^{ij'}(x, 0) G_{\nu\alpha'}^{mk'}(z', 0) + G_{\beta\mu}^{jl}(x, z) G_{\alpha\alpha'}^{ik'}(x, 0) G_{\nu\gamma'}^{mj'}(z', 0) \right) \\ &\quad \left. + O_{\mu\nu}^{(d)lm}(\tau; z, z') G_{\gamma\mu}^{kl}(x, z) G_{\nu\beta'}^{mi'}(z', 0) \left(-G_{\alpha\gamma'}^{ij'}(x, 0) G_{\beta\alpha'}^{jk'}(x, 0) + G_{\alpha\alpha'}^{ik'}(x, 0) G_{\beta\gamma'}^{jj'}(x, 0) \right) \right\rangle_U \end{aligned}$$

und dem unzusammenhängenden Anteil

$$\begin{aligned}
C_{B_3}^u(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) &= \epsilon_{ijk} \epsilon_{i'j'k'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} \Gamma_{\alpha\alpha'} \\
&\sum_{\vec{x}, z, z'} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \left\langle G_{\gamma\beta'}^{ki'}(x, 0) G_{\nu\mu}^{ml}(z', z) \left(O_{\mu\nu}^{(u)lm}(\tau; z, z') + O_{\mu\nu}^{(d)lm}(\tau; z, z') \right) \right. \\
&\left. \left(G_{\alpha\gamma'}^{ij'}(x, 0) G_{\beta\alpha'}^{jk'}(x, 0) - G_{\alpha\alpha'}^{ik'}(x, 0) G_{\beta\gamma'}^{jj'}(x, 0) \right) \right\rangle_U.
\end{aligned} \tag{4.37}$$

Aus Gl. (4.37) ist ersichtlich, daß der unzusammenhängende Beitrag verschwindet, falls

$$O_{\mu\nu}^{(u)lm}(\tau; z, z') + O_{\mu\nu}^{(d)lm}(\tau; z, z') = 0 \tag{4.38}$$

gilt, d.h. falls der Operator keinen Flavour-Singulett-Anteil enthält. Wir werden im Folgenden nur solche Operatoren betrachten und dabei

$$O_{\mu\nu}^{lm}(\tau; z, z') := O_{\mu\nu}^{(u)lm}(\tau; z, z') = -O_{\mu\nu}^{(d)lm}(\tau; z, z') \tag{4.39}$$

setzen.

Um den zusammenhängenden Anteil zu berechnen, schreiben wir den Ausdruck (4.37) um:

$$C_{B_3}^z(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) = \sum_{z, z'} \left\langle T_{\alpha'\mu}^{k'l}(z) O_{\mu\nu}^{lm}(\tau; z, z') G_{\nu\alpha'}^{mk'}(z', 0) \right\rangle_U \tag{4.40}$$

mit

$$T_{\alpha'\mu}^{k'l}(z) = \sum_y G_{\alpha\mu}^{il}(y, z) S_{\alpha\alpha'}^{ik'}(y) \tag{4.41}$$

und

$$\begin{aligned}
S_{\alpha\alpha'}^{ik'}(y) &= \epsilon_{ijk} \epsilon_{i'j'k'} \delta_{y_4 t} e^{-i\vec{p}\vec{y}} G_{\beta\gamma'}^{jj'}(y, 0) G_{\gamma\beta'}^{ki'}(y, 0) \left[\right. \\
&\Gamma_{\alpha\alpha'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} + \Gamma_{\alpha\gamma'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\alpha'} \\
&+ \Gamma_{\beta\alpha'} (C^{-1} \gamma_5)_{\alpha\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} + \Gamma_{\beta\gamma'} (C^{-1} \gamma_5)_{\alpha\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\alpha'} \\
&\left. - \Gamma_{\beta\beta'} (C^{-1} \gamma_5)_{\gamma\alpha} (\gamma_5 C)_{\alpha'\gamma'} - \Gamma_{\beta\gamma'} (C^{-1} \gamma_5)_{\gamma\alpha} (\gamma_5 C)_{\alpha'\beta'} \right].
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Zur Berechnung von T machen wir in Gl. (4.41) Gebrauch von der Beziehung $G(y, z)^\dagger = \gamma_5 G(z, y) \gamma_5$:

$$T_{\alpha'\mu}^{k'l}(z) = \sum_y G_{\alpha\mu}^{il}(y, z) S_{\alpha\alpha'}^{ik'}(y) \tag{4.43}$$

$$= \sum_y \left[\gamma_{5,\mu\zeta} G_{\zeta\eta}^{li}(z, y) \gamma_{5,\eta\alpha} S_{\alpha\alpha'}^{ik'}(y)^* \right]^*. \tag{4.44}$$

Wir erhalten T also durch Lösen der Diracgleichung

$$\sum_z D_{\eta\zeta}^{il}(y, z) Q_{\zeta\alpha'}^{lk'}(z) = \gamma_{5,\eta\alpha} S_{\alpha\alpha'}^{ik'}(y)^* \tag{4.45}$$

und anschließendes Setzen von

$$T_{\alpha'\mu}^{k'l}(z) = \left[\gamma_{5,\mu\zeta} Q_{\zeta\alpha'}^{lk'}(z) \right]^* . \quad (4.46)$$

Insgesamt müssen also zwei Diracgleichungen gelöst werden: Zunächst wird $G(x, 0)$ als Lösung einer Diracgleichung mit einer Punktquelle (Gl. (4.18)) bestimmt; hieraus wird gemäß (4.42) die Quelle für die zweite Diracgleichung (4.45) erzeugt.

Das asymptotische Verhalten der Nukleon-Dreipunktfunktion ist

$$C_{B_3}(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) \stackrel{0 \ll \tau \ll t \ll T}{\longrightarrow} e^{-m_p t} \sum_{s, s'} \frac{1}{4E_{\vec{p}}^2} \Gamma_{\alpha\beta} \langle 0 | B_{\alpha}(\vec{p}) | \vec{p}, s \rangle \langle \vec{p}, s | O | \vec{p}, s' \rangle \langle \vec{p}, s' | \bar{B}_{\beta}(\vec{p}) | 0 \rangle \quad (4.47)$$

$$= e^{-m_p t} Z_p \frac{1}{4E_{\vec{p}}^2} \sum_{s, s'} \Gamma_{\alpha\beta} u_{m_p, \alpha}(p, s) \langle \vec{p}, s | O | \vec{p}, s' \rangle \bar{u}_{m_p, \beta}(p, s'). \quad (4.48)$$

4.1.4 Ausgedehnte Quellen

Bis jetzt haben wir für die Operatoren, die die Hadronzustände erzeugen bzw. vernichten, stets „Punktoperatoren“ der Form (für Mesonen)

$$O(t) = \sum_{\vec{x}} \bar{\psi}(t, \vec{x}) \Gamma \psi(t, \vec{x}) \quad (4.49)$$

betrachtet. Um angeregte Zustände zu unterdrücken, können stattdessen ausgedehnte („verschmierte“) Operatoren der Form

$$O(t) = \sum_{\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}} S(t; \vec{x}, \vec{y}) \bar{\psi}(t, \vec{y}) \Gamma \psi(t, \vec{z}) S(t; \vec{z}, \vec{x}) \quad (4.50)$$

benutzt werden. Dabei muß der Kern $S(t; \vec{x}, \vec{y})$ eichkovariant sein, d. h. unter einer Eichtransformation muß $S(t; \vec{x}, \vec{y})$ wie

$$S(t; \vec{x}, \vec{y}) \rightarrow g(t; \vec{x}) S(t; \vec{x}, \vec{y}) g(t; \vec{y})^{-1} \quad (4.51)$$

transformieren. Wir haben in dieser Arbeit das *Jacobi-Verfahren*[43] benutzt: Dabei ist zu gegebenen Parametern κ_S, N_S der Kern $S_{\kappa_S, N_S}(t; \vec{x}, \vec{y})$ definiert durch

$$\begin{aligned} S_{t; \kappa_S, N_S}(t; \vec{x}, \vec{y}) &= \delta_{\vec{x}, \vec{y}} + \kappa_S D(t; \vec{x}, \vec{y}) + \kappa_S^2 \sum_{\vec{z}} D(t; \vec{x}, \vec{z}) D(t; \vec{z}, \vec{y}) \\ &+ \dots + \kappa_S^{N_S} \sum_{\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_{N_S-1}} D(t; \vec{x}, \vec{z}_1) D(t; \vec{z}_1, \vec{z}_2) \dots D(t; \vec{z}_{N_S-1}, \vec{y}) \end{aligned} \quad (4.52)$$

mit der kovarianten Ableitung

$$D(t; \vec{x}, \vec{y}) = \sum_{i=1}^3 \left(U_i(t, \vec{x}) \delta_{\vec{x}+\hat{i}, \vec{y}} + U_i^\dagger(t, \vec{x} - \hat{i}) \delta_{\vec{x}-\hat{i}, \vec{y}} \right). \quad (4.53)$$

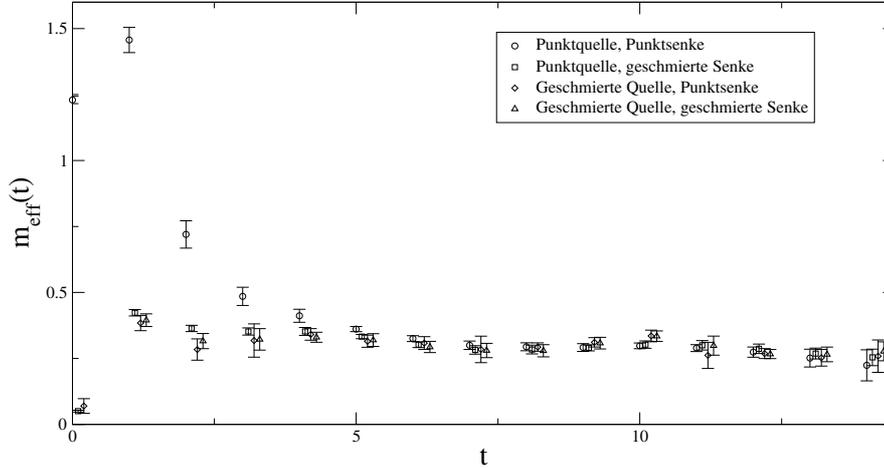


Abbildung 4.1: Vergleich der effektiven Pionmasse für verschiedene Quellen- bzw. Senkenoperatoren ($\beta = 8.45$, $V = 16^3 32$, $am_q = 0.056$).

Die Quellen- und Senkenoperatoren können unabhängig voneinander durch ausgedehnte Operatoren ersetzt werden. In Abb. 4.1 haben wir die effektive Pionmasse für verschiedene Operatorkombinationen dargestellt. Durch das Verschmieren der Quelle oder Senke wird erreicht, daß das Plateau, das zum Ablesen der Pionmasse genutzt wird, bereits bei kleineren Zeiten beginnt.

4.1.5 Diracoperator-Eigenmoden

Mit abnehmender Quarkmasse nehmen die statistischen Fluktuationen in den Korrelationsfunktionen zu, wie aus der Spektraldarstellung des Propagators

$$G(x, y) = \sum_i \frac{1}{\lambda_i + m_q} \phi^i(x) \phi^i(y)^\dagger \quad (4.54)$$

mit den Eigenmoden $\phi^i(x)$ des Dirac-Operators und zugehörigen Eigenwerten λ_i offensichtlich wird. Aus (4.54) geht ebenfalls hervor, daß für hinreichend kleine Quarkmassen der größte Beitrag zu den Korrelationsfunktionen von den Eigenmoden zu den kleinsten Eigenwerten des Diracoperators herrührt. Zur Illustration haben wir in Abb. 4.2 eine Pion-Zweipunktfunction auf einer einzelnen Eichfeldkonfiguration ($\beta = 8.45$, $V = 24^3 48$, $am_q = 0.0112$) dargestellt; ebenfalls dargestellt ist der Beitrag der 40 kleinsten Eigenvektoren des Diracoperators zu dieser Korrelationsfunktion. Im Bereich $10 < t < N_T - 10$ liefern diese Eigenvektoren den dominanten Beitrag zur Korrelationsfunktion.

Von verschiedenen Autoren wurde vorgeschlagen[44, 45, 46], die statistischen Fluktuationen zu reduzieren, indem der Beitrag der kleinen Eigenvektoren zu einer Korrelations-

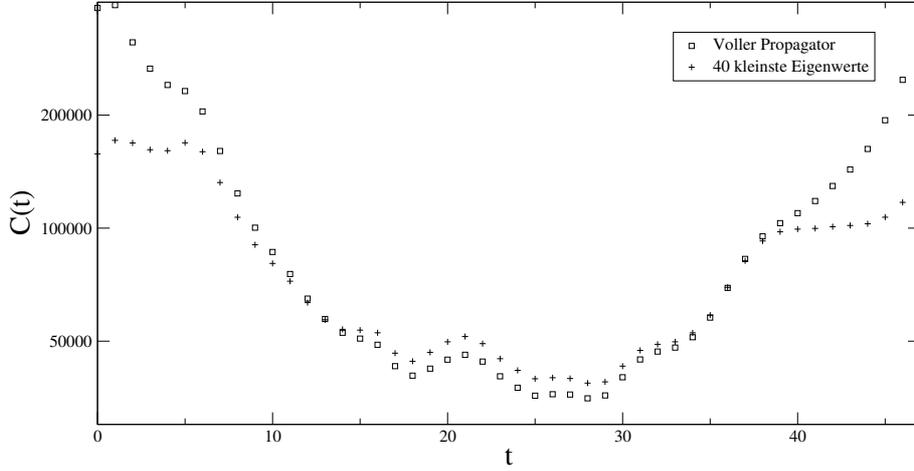


Abbildung 4.2: Pion-Korrelationsfunktion auf einer einzelnen Eichfeldkonfiguration ($\beta = 8.45$, $am_q = 0.0112$) sowie der Beitrag der Eigenmoden des Diracoperators zu den 40 kleinsten Eigenwerten zu dieser Korrelationsfunktion.

funktion für alle Gitterpunkte berechnet wird (anstatt Translationsinvarianz auszunutzen).

Dazu betrachten wir zunächst eine Meson-Zweipunktfunction $C_{M_2}(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t)$. Aus der Spektraldarstellung (4.54) erhalten wir folgende Darstellung der Zweipunktfunction:

$$C_{M_2}(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) = \frac{1}{V} \sum_{t_0, \vec{x}, \vec{y}} e^{-i\vec{p}(\vec{x}-\vec{y})} \langle \bar{\psi}(x) \Gamma_1 \psi(x) \bar{\psi}(y) \Gamma_2 \psi(y) \rangle_U \quad (4.55)$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{t_0, \vec{x}, \vec{y}} e^{-i\vec{p}(\vec{x}-\vec{y})} \langle \text{tr}(G(x, y) \Gamma_2 G(y, x) \Gamma_1) \rangle_U \quad (4.56)$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{t_0, \vec{x}, \vec{y}} e^{-i\vec{p}(\vec{x}-\vec{y})} \sum_{i,j=1}^N \left\langle \frac{1}{\lambda_i + m_q} \frac{1}{\lambda_j + m_q} \text{tr}(\phi^i(x) \phi^i(y)^\dagger \Gamma_2 \phi^j(y) \phi^j(x)^\dagger \Gamma_1) \right\rangle_U, \quad (4.57)$$

wobei wir hier und im Folgenden die Abkürzungen

$$t_1 = t_0 + t, \quad x = (t_0, \vec{x}), \quad y = (t_1, \vec{y}) \quad (4.58)$$

verwenden.

Die Summe $\sum_{i,j=1}^N$ über alle Eigenwerte kann zerlegt werden in die Summe $\sum_{i,j=1}^n$ über die n kleinsten Eigenwerte und den Rest; entsprechend zerfällt die Korrelationsfunktion:

$$C_{M_2}(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) = C_{M_2}^s(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) + C_{M_2}^l(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) \quad (4.59)$$

mit

$$C_{M_2}^s(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) = \frac{1}{V} \sum_{t_0, \vec{x}, \vec{y}} \sum_{i,j=1}^n e^{-i\vec{p}(\vec{x}-\vec{y})} \left\langle \frac{1}{\lambda_i + m_q} \frac{1}{\lambda_j + m_q} \text{tr}(\phi^i(x) \phi^i(y)^\dagger \Gamma_2 \phi^j(y) \phi^j(x)^\dagger \Gamma_1) \right\rangle_U \quad (4.60)$$

Um $C_{M_2}^s$ zu berechnen, ordnen wir die Summen um:

$$C_{M_2}^s(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) = \frac{1}{V} \Gamma_{1,\alpha\beta} \Gamma_{2,\mu\nu} \sum_{t_0} \sum_{i,j} \left\langle \frac{1}{\lambda_i + m_q} \frac{1}{\lambda_j + m_q} C_{\alpha\beta}^{ji}(\vec{p}, t_0) C_{\mu\nu}^{ij}(-\vec{p}, t_1) \right\rangle_U \quad (4.61)$$

mit

$$C_{\alpha\beta}^{ij}(\vec{p}, t) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \phi_{\alpha\alpha}^i(x) \phi_{\beta\beta}^j(x), \quad (4.62)$$

wobei wir Spinorindizes mit griechischen Buchstaben, Farbindices mit a, b, \dots , und die Indizes, die die Eigenvektoren numerieren, mit i, j, \dots bezeichnen.

Bei der Berechnung des Beitrages von $C_{M_2}^l$ nutzen wir Translationsinvarianz aus:

$$C_{M_2}^l(\Gamma_1, \Gamma_2, \vec{p}, t) = \sum_{\substack{\vec{x} \\ x=(t, \vec{x})}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \left\langle \text{tr}(G(x, 0) \Gamma_2 G(0, x) \Gamma_1) - \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{\lambda_i + m_q} \frac{1}{\lambda_j + m_q} \text{tr}(\phi^i(x) \phi^i(0)^\dagger \Gamma_2 \phi^j(0) \phi^j(x)^\dagger \Gamma_1) \right\rangle_U. \quad (4.63)$$

Für eine Proton-Zweipunktfunction führt eine analoge Überlegung zur Zerlegung

$$C_{B_2}(\Gamma, t, \vec{p}) = C_{B_2}^s(\Gamma, t, \vec{p}) + C_{B_2}^l(\Gamma, t, \vec{p}). \quad (4.64)$$

Der Beitrag der kleinen Eigenvektoren ist

$$C_{B_2}^s(\Gamma, t, \vec{p}) = \frac{1}{V} \left[\Gamma_{\alpha\alpha'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} + \Gamma_{\alpha\gamma'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\alpha'} \right] \quad (4.65)$$

$$\sum_{t_0} \sum_{i,j,k} \left\langle \frac{1}{(\lambda_i + m_q)(\lambda_j + m_q)(\lambda_k + m_q)} C_{\gamma\alpha\beta}^{ijk}(\vec{p}, t_1) \left(C_{\beta'\gamma'\alpha'}^{ikj}(\vec{p}, t_0) \right)^* \right\rangle_U \quad (4.66)$$

mit

$$C_{\alpha\beta\gamma}^{ijk}(\vec{p}, t) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \epsilon_{abc} \phi_{a\alpha}^i(x) \phi_{b\beta}^j(x) \phi_{c\gamma}^k(x). \quad (4.67)$$

Der restliche Beitrag ergibt sich zu

$$C_{B_2}^l(\Gamma, t, \vec{p}) = \sum_{\substack{\vec{x} \\ x=(t, \vec{x})}} e^{-i\vec{p}\vec{x}} \epsilon_{abc} \epsilon_{a'b'c'} \left[\Gamma_{\alpha\alpha'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} + \Gamma_{\alpha\gamma'} (C^{-1} \gamma_5)_{\beta\gamma} (\gamma_5 C)_{\beta'\alpha'} \right] \cdot \left\langle \left(G_{\gamma\beta'}^{ca'}(x, 0) G_{\alpha\alpha'}^{ac'}(x, 0) G_{\beta\gamma'}^{bb'}(x, 0) \right) - \sum_{i,j,k} \frac{1}{(\lambda_i + m_q)(\lambda_j + m_q)(\lambda_k + m_q)} \left(\phi_{c\gamma}^i(x) \phi_{a'\beta'}^i(0)^* \phi_{a\alpha}^j(x) \phi_{c'\alpha'}^j(0)^* \phi_{b\beta}^k(x) \phi_{b'\gamma'}^k(0)^* \right) \right\rangle_U \quad (4.68)$$

Auch für Proton-Dreipunktfunktionen läßt sich dieses Verfahren anwenden. Der Einfachheit halber betrachten wir einen lokalen Operator

$$O(t) = \sum_{\vec{x}} (\bar{u}(x)Mu(x) - \bar{d}(x)Md(x)) \quad (4.69)$$

Dann ist

$$C_{B_3}(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) = C_{B_3}^s(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) + C_{B_3}^l(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) \quad (4.70)$$

mit

$$\begin{aligned} C_3^s(O, \Gamma, \vec{p}, \tau, t) = & -\frac{1}{V}M_{\mu\nu} \\ & \left(\Gamma_{\alpha\alpha'}(C^{-1}\gamma_5)_{\beta\gamma}(\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} + \Gamma_{\alpha\gamma'}(C^{-1}\gamma_5)_{\beta\gamma}(\gamma_5 C)_{\beta'\alpha'} + \Gamma_{\beta\alpha'}(C^{-1}\gamma_5)_{\alpha\gamma}(\gamma_5 C)_{\beta'\gamma'} \right. \\ & \left. + \Gamma_{\beta\gamma'}(C^{-1}\gamma_5)_{\alpha\gamma}(\gamma_5 C)_{\beta'\alpha'} - \Gamma_{\beta\beta'}(C^{-1}\gamma_5)_{\gamma\alpha}(\gamma_5 C)_{\alpha'\gamma'} - \Gamma_{\beta\gamma'}(C^{-1}\gamma_5)_{\gamma\alpha}(\gamma_5 C)_{\alpha'\beta'} \right) \\ & \sum_{t_0} \sum_{i,j,k,l} \left\langle \frac{1}{(\lambda_i + m_q)(\lambda_j + m_q)(\lambda_k + m_q)(\lambda_l + m_q)} \right. \\ & \left. C_{\alpha\beta\gamma}^{jkl}(\vec{p}, t_1) C_{\mu\nu}^{ji}(\vec{0}, t_0 + \tau) C_{\alpha'\gamma'\beta'}^{ikl}(\vec{p}, t_0)^* \right\rangle_U \end{aligned} \quad (4.71)$$

während wir zur Berechnung von C_3^l wiederum Gebrauch von Translationsinvarianz machen.

Die Auswirkungen der Verbesserung der Korrelationsfunktionen durch die Eigenmoden zu den kleinen Eigenwerten sind in Abb. 4.3 und Abb. 4.4 anhand einer Pion- bzw. Proton-Zweipunktfunktion (jeweils bei $V = 24^3 48$, $\beta = 8.45$, $am_q = 0.0112$) dargestellt; Abb. 4.5 und Abb. 4.6 zeigen die entsprechenden effektiven Massen. Wir haben jeweils die aus einem Propagator pro Eichfeldkonfiguration berechnete Zweipunktfunktion mit der nach Gl. (4.59) bzw. (4.64) verbesserten Zweipunktfunktion verglichen; es wurden jeweils die 40 kleinsten Eigenwerte einbezogen. Die statistischen Fehler in den Zweipunktfunktionen werden dadurch deutlich reduziert. Bei größeren Quarkmassen verschwindet dieser Effekt jedoch.

4.2 Inversion des Overlap-Operators

Zur Berechnung fermionischer Observablen müssen Gleichungssysteme der Art

$$D_{m_q}\chi = \eta \quad (4.72)$$

gelöst werden.

Dies geschieht für Probleme dieser Größenordnung am effizientesten mittels sogenannter Krylov-Verfahren, bei denen eine Näherungslösung x_n der linearen Gleichung

$$Ax = y \quad (4.73)$$

in einem *Krylovraum*

$$K_n = \text{span}(y, Ay, A^2y, \dots, A^{n-1}y) \quad (4.74)$$

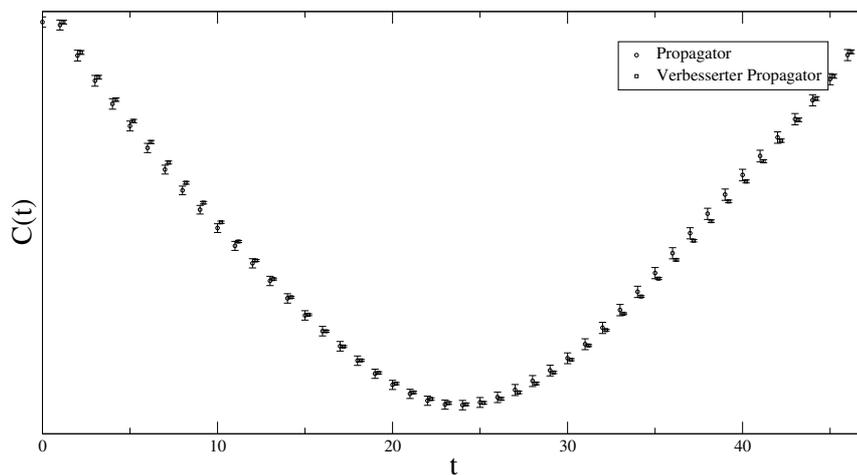


Abbildung 4.3: Eigenmodenverbesserung der Pion-Zweipunktfunktion ($\beta = 8.45$, $am_q = 0.0112$).

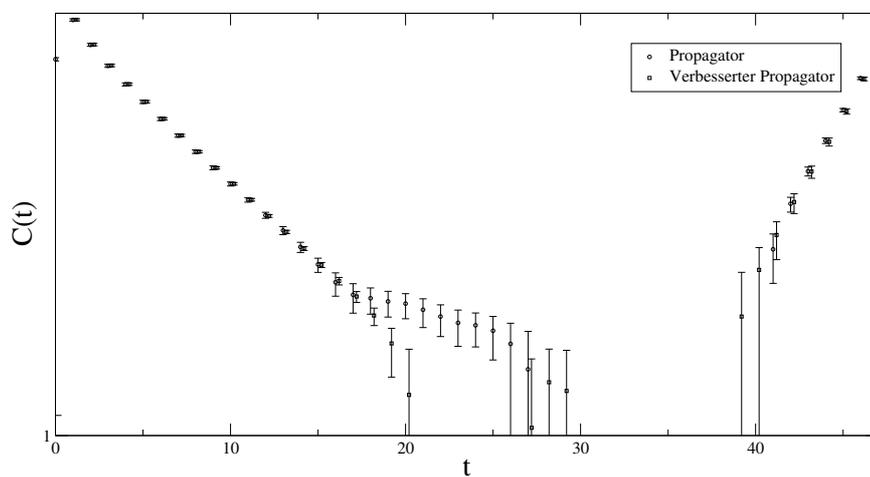


Abbildung 4.4: Eigenmodenverbesserung der Proton-Zweipunktfunktion ($\beta = 8.45$, $am_q = 0.0112$).

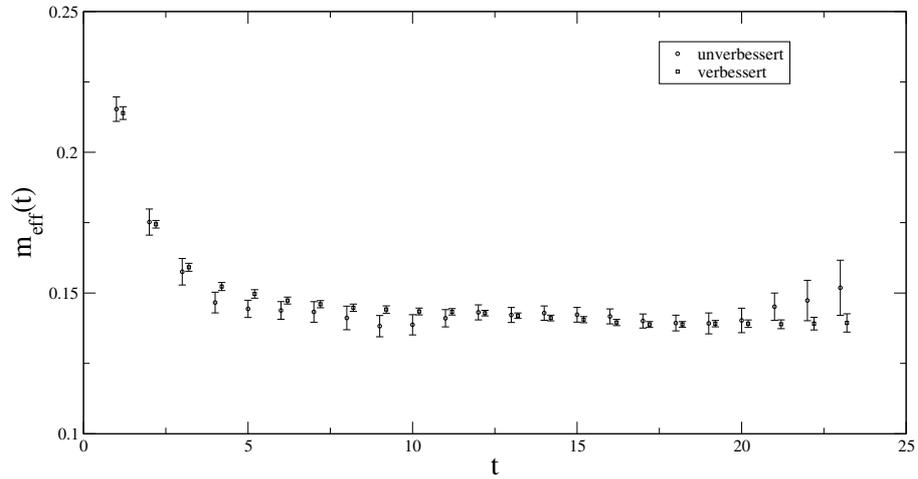


Abbildung 4.5: Eigenmodenverbesserung der effektiven Pionmasse ($\beta = 8.45$, $am_q = 0.0112$).

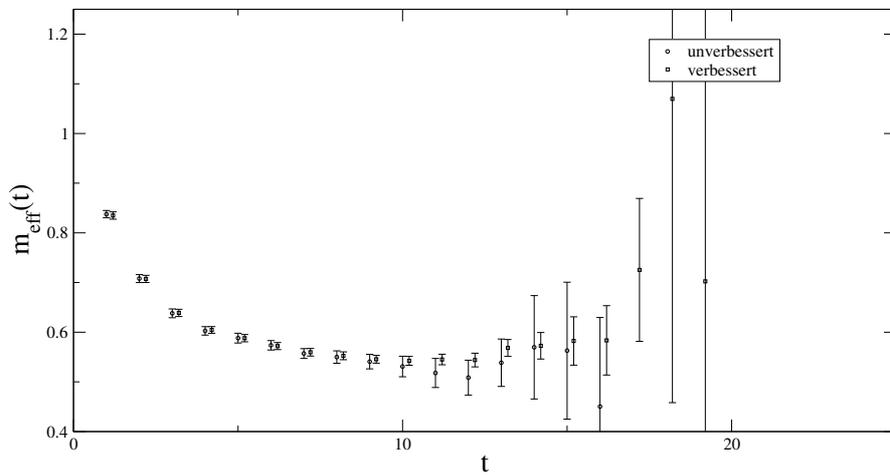


Abbildung 4.6: Eigenmodenverbesserung der effektiven Protonmasse ($\beta = 8.45$, $am_q = 0.0112$).

bestimmt wird. Das einfachste dieser Verfahren ist die Methode der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren) [47]; es ist allerdings nur für eine hermitesche positiv definite Matrix A definiert. Um (4.72) mit dem CG-Verfahren zu lösen, kann man $A = D_{m_q}^\dagger D_{m_q}$ setzen; allerdings sind nun pro Iteration zwei Multiplikationen mit dem Overlap-Operator nötig. Die Konvergenzgeschwindigkeit des Verfahrens hängt von der Konditionierungszahl $\kappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$ der Matrix A ab: Bezüglich der Norm

$$\|x\|_A = \sqrt{(x, Ax)} \quad (4.75)$$

gilt die Abschätzung[47]

$$\|x_n - x\|_A \leq 2\alpha_{\text{CG}}^n \|y - x\|_A \quad (4.76)$$

mit

$$\alpha_{\text{CG}} = \frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1}. \quad (4.77)$$

Die Anzahl n_{it} der benötigten Iterationsschritte um eine bestimmte Genauigkeit δ zu erreichen ist also proportional zu $\frac{\log \delta}{\log \alpha}$. Mit $A = D_{m_q}^\dagger D_{m_q}$ ergibt sich $\kappa(A) \approx \frac{1}{m_q^2}$ und damit erhalten wir für $am_q \ll 1$ für die Anzahl n_D der Multiplikationen mit dem Dirac-Operator $n_D \propto \frac{1}{am_q}$.

Die Konvergenz des Verfahrens läßt sich durch *Präkonditionierung* beschleunigen: An Stelle von (4.73) löst man die äquivalente Gleichung

$$\tilde{A}x = Cy \quad (4.78)$$

mit

$$\tilde{A} = CA, \quad (4.79)$$

wobei C eine nichtsinguläre Matrix ist, die so gewählt wird, daß $\kappa(\tilde{A})$ möglichst klein wird. Eine Möglichkeit, dies zu erreichen, besteht darin, die n_p kleinsten Eigenwerte λ_i von A und die zugehörigen Eigenvektoren v_i zu berechnen und

$$C = 1 + \sum_i^{n_p} \left(\frac{1}{\lambda_i} - 1 \right) v_i v_i^\dagger \quad (4.80)$$

zu setzen. Damit gilt

$$\tilde{A} = \left(1 + \sum_{i=1}^{n_p} \left(\frac{1}{\lambda_i} - 1 \right) v_i v_i^\dagger \right) \left(\sum_{j=1}^N \lambda_j v_j v_j^\dagger \right) \quad (4.81)$$

$$= \sum_{i=1}^N \tilde{\lambda}_i v_i v_i^\dagger \quad (4.82)$$

mit

$$\tilde{\lambda}_i = \begin{cases} 1 & \text{für } 1 \leq i \leq n_p \\ \lambda_i & \text{für } n_p + 1 \leq i \leq N. \end{cases} \quad (4.83)$$

Unter der Voraussetzung, daß $\lambda_{n_p} < 1$ ist, gilt damit

$$\kappa(\tilde{A}) = \frac{\lambda_N}{\lambda_{n_p+1}}, \quad (4.84)$$

d.h. die Konditionierungszahl von \tilde{A} ist um den Faktor $\frac{\lambda_{n_p+1}}{\lambda_1}$ kleiner als die von A . Angewandt auf den obigen Algorithmus erreicht man damit

$$n_D \propto \frac{1}{\sqrt{\lambda_{n_p+1} + m_q^2}}, \quad (4.85)$$

insbesondere wächst n_D für kleine Quarkmassen nicht mehr unbegrenzt.

