

2. QCD auf dem Gitter

In der Pfadintegralformulierung der QCD besteht deren Wirkung aus einem rein von den Eichfeldern abhängigen Teil S_g und dem fermionischen Part S_f :

$$S_{\text{QCD}} = -\frac{1}{4} \int d^4x F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \int d^4x \bar{\psi} [i\gamma^\mu D_\mu - m_0] \psi = S_g + S_f \quad (2.1)$$

In dieser Gleichung ist $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig_0[A_\mu, A_\nu]$ der Feldstärketensor und $D_\mu = \partial_\mu + ig_0 A_\mu$ die kovariante Ableitung. In der QCD gehören die Eichfelder A_μ zur Lie-Algebra der SU(3) Eichgruppe. Bei den fermionischen Feldern ψ und $\bar{\psi}$ handelt es sich um Dirac-Spinoren, deren Komponenten vollständig anti-kommutierende Grassmann-Variablen sind. g_0 und m_0 bezeichnen die Eichfeldkopplung und einen Massenparameter, wobei der Index deutlich machen soll, dass es sich um nackte Parameter handelt.

Für eine numerische Behandlung des Pfadintegrals ist es sinnvoll, statt der ursprünglichen Wirkung im Minkowski-Raum S_{QCD} eine durch Wick-Rotation euklidisierte Wirkung $S_{\text{QCD}}^{(E)}$ zu betrachten. Dies bedeutet, dass x^0 durch ix_4 und im Pfadintegral der Term $\exp[iS_{\text{QCD}}]$ durch $\exp[-S_{\text{QCD}}^{(E)}]$ ersetzt wird. Damit haben wir dort statt eines oszillierenden Terms einen positiven, exponentiell dämpfenden stehen. Ab hier werden wir ausschließlich im Euklidischen arbeiten und daher auf eine spezielle Kennzeichnung verzichten.

In diesem Kapitel soll diskutiert werden, wie die euklidisierte Wirkung der QCD diskretisiert und damit auf das Gitter gebracht werden kann.

2.1. Einführung des Gitters

In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich isotrope Gitter betrachtet. Der mit a bezeichnete Gitterabstand ist somit sowohl in allen Raumrichtungen als auch in der Zeitrichtung gleich. Die Gitterpunkte können nun durch einen diskreten Index $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ gekennzeichnet werden. Das Gitter werden wir in seiner räumlichen Ausdehnung L in allen Richtungen gleich, in seiner zeitlichen Ausdehnung T jedoch größer (meist doppelt so groß wie in der räumlichen) wählen, so dass $0 \leq x_i < L$ und $0 \leq x_4 < T$ gilt. Das Volumen werden wir mit V bezeichnen, wobei $V = L^3 T$ ist.

Um die Kontinuumstheorie auf das Gitter zu bringen, werden wir Integration und partielle Differentiation bis zur zweiten Ordnung auf dem Gitter durch folgende Operationen ersetzen:

$$\begin{aligned} \partial_\mu f(x) &\rightarrow \begin{cases} \Delta_\mu^f f_x = \frac{1}{a} [f_{x+\hat{\mu}} - f_x] \\ \Delta_\mu^b f_x = \frac{1}{a} [f_x - f_{x-\hat{\mu}}] \end{cases} \\ \square f(x) &\rightarrow \Delta_\mu^b \Delta_\mu^f f_x = \frac{1}{a^2} \sum_\mu [f_{x+\hat{\mu}} - 2f_x + f_{x-\hat{\mu}}] \\ \int d^4x &\rightarrow a^4 \sum_x \end{aligned}$$

Dimensionsbehaftete Größen müssen in der Gitterformulierung durch dimensionslose ersetzt werden. Dies wird dadurch realisiert, dass diese Größen mit entsprechenden Potenzen des Gitterabstandes a multipliziert werden. So ist

$$\begin{aligned} m_0 &\rightarrow am_0 \\ \psi(x) &\rightarrow a^{3/2} \psi_x \end{aligned}$$

zu ersetzen.

2.2. Eichfeldwirkung

Um die Eichfelder auf dem Gitter zu definieren, ist es zweckmäßig, den (dimensionslosen) Paralleltransporter

$$U(y_1, y_2) = \mathcal{P} e^{igo \int_{y_1}^{y_2} dx_\mu A_\mu(x)} \quad (2.2)$$

zu verwenden, wobei \mathcal{P} der Pfadordnungsoperator ist. Auf dem Gitter definieren wir nun

$$U_{x,\mu} = U(x, x + a\hat{\mu}) = 1 + aA_\mu + O(a^2), \quad (2.3)$$

wobei $U_{x,-\mu} = U_{x-\hat{\mu},\mu}^\dagger$ und $\hat{\mu}$ der Einheitsvektor in der μ -Richtung ist.

$U_{x,\mu}$ ist ein Element der Eichgruppe und kann mit dem Integrationspfad und somit den Verbindungslinien zwischen zwei unmittelbar benachbarten Gitterpunkten, die wir „links“ nennen, assoziiert werden. Wir werden im Folgenden statt von Paralleltransportern auf dem Gitter kurz von den Eichfeldern sprechen, wenn $U_{x,\mu}$ gemeint ist.

Bei einer lokalen Eichtransformation $\Lambda_x \in \text{SU}(3)$ transformiert $U_{x,\mu}$ wie folgt:

$$U_{x,\mu} \rightarrow \Lambda_x U_{x,\mu} \Lambda_{x+\hat{\mu}}^\dagger \quad (2.4)$$

Daraus folgt unmittelbar, dass das geordnete Produkt der Eichfelder entlang eines geschlossenen Pfades eichinvariant ist. Auf dem Gitter führt der kürzeste geschlossene Pfad um eine Plaquette, wie sie in Abbildung 2.1 dargestellt ist. Das Produkt der Felder entlang dieses Pfads, kurz Plaquettwert genannt, ist dann

$$U_{x,\mu\nu}^\square = U_{x,\mu} U_{x+\hat{\mu},\nu} U_{x+\hat{\nu},\mu}^\dagger U_{x,\nu}^\dagger. \quad (2.5)$$

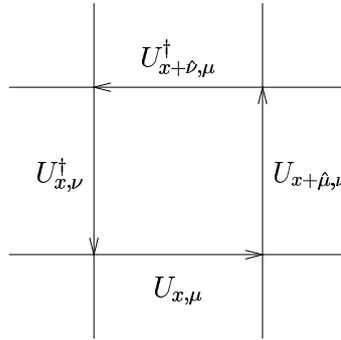


Abbildung 2.1.: Graphische Darstellung des geordneten Produkts der Eichfelder um eine Plaquette.

Man kann nun zeigen, dass

$$\frac{1}{g_0^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \left[1 - \frac{1}{2} (U_{x,\mu\nu}^\square + U_{x,\mu\nu}^{\square+}) \right] = \frac{1}{4} a^4 \sum_x \sum_{\mu, \nu} F_{x,\mu\nu} F_{x,\mu\nu} + O(a^2) \quad (2.6)$$

ist, wobei $F_{x,\mu\nu}$ die diskretisierte Version des Feldstärketensors

$$\begin{aligned} F_{x,\mu\nu} &= \frac{1}{a} ((A_{x+\hat{\mu},\nu} - A_{x,\nu}) - (A_{x+\hat{\nu},\mu} - A_{x,\mu})) + ig_0 [A_{x,\mu}, A_{x,\nu}] \\ &= F_{\mu\nu}(x) + O(a) \end{aligned} \quad (2.7)$$

ist. Im Kontinuumslimit geht somit $F_{x,\mu\nu} \rightarrow F_{\mu\nu}(x)$ über, so dass wir die Spur der linken Seite von Gleichung (2.6) als diskretisierte Version der Eichfeldwirkung S_g identifizieren können. Diese Wirkung wurde in dieser Form erstmals von Wilson [8] formuliert.

Für $SU(N)$ als Eichgruppe lässt sich diese Wirkung auch in folgender Form schreiben

$$S_g = \beta \sum_x \sum_{\mu < \nu} \left[1 - \frac{1}{N} \text{Re tr } U_{\mu\nu}^\square(x) \right], \quad (2.8)$$

wobei $\beta = 2N/g_0^2$ ist.

2.3. Fermionen auf dem Gitter

Fermionen auf das Gitter zu bringen, erweist sich als wesentlich komplizierter. Zuerst müssen wir die kovariante Ableitung D_μ eichinvariant auf dem Gitter definieren. Wegen des kleineren Diskretisierungsfehlers ist es sinnvoll, und damit die Theorie renormierbar bleibt auch notwendig (siehe [12]), den symmetrisierten Ableitungsoperator $\frac{1}{2}(\Delta_\mu^f + \Delta_\mu^b)$ zu verwenden. Unter einer lokalen Eichtransformation geht $\psi_x \rightarrow \Lambda_x \psi_x$ über. Zusammen mit Gleichung (2.4) ergibt sich damit sofort, dass folgende Definition von D_μ auf dem Gitter eichinvariant ist

$$\frac{1}{2}(\Delta_\mu^f + \Delta_\mu^b)\psi_x = \frac{1}{2a} \left[U_{x,\mu} \psi_{x+\hat{\mu}} - U_{x-\hat{\mu},\mu}^\dagger \psi_{x-\hat{\mu}} \right] = D_\mu \psi(x) + O(a^2) \quad (2.9)$$

und lediglich um Terme $O(a^2)$ vom Kontinuumswert abweicht.

Es ist nun naheliegend, die fermionische Wirkung auf dem Gitter wie folgt zu definieren

$$S_f = a^4 \sum_x \bar{\psi}_x \left[\frac{\gamma_\mu}{2} (\Delta_\mu^f + \Delta_\mu^b) + m_0 \right] \psi_x = a^3 \sum_{x,y} \bar{\psi}_x M_{xy} \psi_y \quad (2.10)$$

wobei M_{xy} als *Fermionmatrix* bezeichnet wird. Diese Formulierung der Fermionen auf dem Gitter wird üblicherweise als „naiv“ apostrophiert. Die Wirkung scheint nur um Terme, die proportional a^2 verschwinden, von der Kontinuumswirkung abzuweichen. Ein genauere Untersuchung zeigt jedoch, dass dies falsch ist.

Der Propagator ist im Kontinuum durch

$$\begin{aligned} G(x, y) &= \frac{\partial^2}{\partial \eta(x) \partial \bar{\eta}(y)} \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int DU D\psi D\bar{\psi} e^{-S_g} e^{-\bar{\psi} M \psi + \eta \bar{\psi} + \bar{\eta} \psi} \Big|_{\bar{\eta}=\eta=0} \\ &= \langle \bar{\psi}(x) \psi(y) \rangle = \langle M^{-1}(x, y) \rangle \end{aligned} \quad (2.11)$$

gegeben, wobei

$$\mathcal{Z}_0 = \int DU D\psi D\bar{\psi} e^{-(S_g + S_f)} \quad (2.12)$$

ist. Auf dem Gitter läßt sich der Propagator im freien Fall exakt berechnen, da die Fouriertransformierte von M_{xy} diagonal ist. Die Fermionmatrix hat nun die einfache Form

$$M_{xy} = \frac{\gamma_\mu}{2} (\delta_{x+\hat{\mu},y} - \delta_{x-\hat{\mu},y}) + am_0 \delta_{x,y}. \quad (2.13)$$

Wählen wir für die folgenden Rechnungen die Ausdehnung des Gitters in allen Richtungen gleich und setzen $L = T$, so erhalten wir mit periodischen

Randbedingungen für den Propagator

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{a^3} G_{xy} &= \frac{1}{a^3} M_{xy}^{-1} \\
 &= \frac{1}{a^3 L^4} \sum_{k=-L/2+1}^{+L/2} e^{i2\pi k(x-y)/L} [i\gamma_\mu \sin(2\pi k_\mu/L) + am_0]^{-1} \quad (2.14) \\
 &= \frac{1}{a^3 L^4} \sum_p e^{iap(x-y)} G_p,
 \end{aligned}$$

wobei $ap_\mu = (2\pi k_\mu)/L$ mit $-\pi < ap_\mu \leq +\pi$ und

$$G_p = \frac{am_0 - i\gamma_\mu \sin(ap_\mu)}{(am_0)^2 + \left[\sum_\mu \sin(ap_\mu) \right]^2} \quad (2.15)$$

ist.

Die Summe auf der rechten Seite von Gleichung (2.14) wird von den Impulsen dominiert, für die $\sin(ap_\mu)$ klein ist. Dies ist für $ap \simeq (0, 0, 0, 0)$ der Fall. Ersetzt man den Sinus durch sein Argument, so erhält man tatsächlich den gleichen Ausdruck wie im Kontinuum:

$$G(p) \simeq \frac{am_0 - i\gamma_\mu ap_\mu}{(am_0)^2 + (ap)^2}. \quad (2.16)$$

Dabei haben wir jedoch unterschlagen, dass das oben verwendete Argument auch für $ap \simeq (\pi, 0, 0, 0)$, $(\pi, \pi, 0, 0)$ usw. gilt. Wir finden somit in den Ecken der Brillouinzone $2^4 - 1$ zusätzliche entartete Zustände. Dieses Problem ist unter dem Begriff „fermion doubling“ bekannt.

Wie Nielsen und Ninomiya 1981 zeigten [13, 14], handelt es sich hier um ein grundsätzliches Problem. Bei jeder Formulierung von Fermionen auf dem Gitter sollte die Fermionmatrix M möglichst die folgenden Bedingungen erfüllen:

1. M_{xy} sollte lokal sein.
2. Für die Fouriertransformierte \tilde{M}_p sollte im freien Fall gelten, dass $\tilde{M}_p = i\gamma_\mu p_\mu + O(ap^2)$ wenn $p \ll \pi/a$.
3. \tilde{M}_p sollte für $p \neq 0$ im freien Fall grundsätzlich invertierbar sein, d.h. es existieren nicht mehrere masselose Zustände.
4. M erfüllt die Chiralitätsbedingung $\gamma_5 M + M \gamma_5 = 0$.

Das Theorem von Nielsen und Ninomiya besagt, dass diese vier Forderungen nicht gleichzeitig erfüllt sein können.

Die verschiedenen Methoden, mit dem Problem des „fermion doubling“ umzugehen, haben daher alle unterschiedliche Vor- und Nachteile. Aktuell werden auf dem Gitter für Simulationen der QCD unter anderem folgende Fermionen eingesetzt:

Wilson-Fermionen: Nach einem Vorschlag von Wilson [15] kann durch einen zusätzlichen Term, der im Kontinuumslimit verschwindet, erreicht werden, dass die unerwünschten Pole des Propagators um einen Betrag proportional $1/a$ verschoben werden. Diese Zustände bekommen im Kontinuumslimit unendlich große Massen und werden somit entkoppelt. Dies geschieht jedoch um den Preis, dass die chirale Symmetrie für verschwindende Fermionenmasse explizit verletzt wird. Eine modifizierte Form von Wilson-Fermionen wurde im Rahmen dieser Arbeit verwendet. Wir werden daher in den folgenden Abschnitten auf diese Formulierung genauer eingehen.

Kogut-Susskind-Fermionen: Ein anderer Weg wurde von Kogut und Susskind [16, 17] vorgeschlagen. Indem das d -dimensionale Gitter in Hyperkuben bestehend aus 2^d Gitterpunkten unterteilt wird und auf die einzelnen Punkte dieser Hyperkuben je eines der $2^{d/2}$ Komponenten der Dirac-Spinoren von $2^{d/2}$ fermionischen Feldern verteilt werden, lässt sich die Zahl der Fermionen um einen Faktor $2^{d/2}$ reduzieren. Effektiv wird so die Brillouinzone verkleinert. Die verbleibenden entarteten Fermionenzustände werden als Zustände unterschiedlicher Fermionspezies („*flavours*“) interpretiert. Da benachbarte Gitterpunkte jeweils verschiedenen Feldern oder Komponenten zugeordnet sind, ist diese Art von Gitterfermionen auch unter dem Namen „*staggered fermions*“ bekannt geworden.

Domain-Wall-Fermionen: Ein neuerer Weg geht auf einen Vorschlag von Kaplan [18] zur Formulierung chiraler Fermionen auf dem Gitter zurück, für den Shamir [19] den Weg zu numerischen Simulationen bereitete. Bei dieser Formulierung von Fermionen auf dem Gitter wird dieses um eine fünfte Dimension ergänzt. Die Wirkung in den vier physikalischen Dimensionen entspricht im Wesentlichen der von Wilson-Fermionen. Durch die Kopplung in der fünften Dimension wird erreicht, dass die fermionischen Zustände unterschiedlicher Chiralität in den vierdimensionalen Räumen am Rande der fünften Dimension separiert werden, die damit getrennt behandelt werden können. Für eine Übersicht über numerische Simulationen mit Domain-Wall-Fermionen siehe [20, 21, 22].

Ginsparg-Wilson-Fermionen: Es blieb längere Zeit unberücksichtigt, dass das Nielsen-Ninomiya-Theorem gewissermaßen umgangen werden

kann [23, 24, 25], wenn man die Ginsparg-Wilson-Relation [26]

$$M\gamma_5 + \gamma_5 M = aM\gamma_5 M \quad (2.17)$$

als ein Relikt der chiralen Symmetrie auf dem Gitter auffasst. Fermionen, die diese Gleichung erfüllen, werden Ginsparg-Wilson-Fermionen genannt. Realisierungen, wie beispielsweise von Neuberger [23], wurden allerdings aufgrund des hohen numerischen Aufwandes und der damit einhergehenden Anforderungen an effiziente Algorithmen bislang noch kaum zur Simulation der QCD verwendet.¹

2.4. Wilson-Fermionen

Um dem Problem zusätzlicher entarteter Fermionenzustände zu begegnen, wird für die Konstruktion von Wilson-Fermionen die „naive“ Diskretisierung der fermionischen Wirkung um einen Term ergänzt, der im Kontinuumslimites verschwindet. Im freien Fall ist die fermionische Wirkung für Wilson-Fermionen wie folgt definiert

$$\begin{aligned} S_f^W &= a^4 \sum_{x,y} \bar{\psi}_x \left[\frac{\gamma_\mu}{2} (\Delta_\mu^f + \Delta_\mu^b) + m_0 - \frac{ar}{2} \Delta_\mu^b \Delta_\mu^f \right] \psi_x \\ &= a^3 \bar{\psi}_x M_{xy}^W \psi_y, \end{aligned} \quad (2.18)$$

wobei der Wilson-Parameter $0 < r \leq 1$ zu wählen ist.

Auch hier lässt sich der Propagator im freien Fall explizit berechnen. Die Fermionmatrix hat dann die Form

$$M_{xy}^W = M_{xy} - \frac{r}{2} \sum_{\mu} (\delta_{x+\hat{\mu},y} - 2\delta_{x,y} + \delta_{x-\hat{\mu},y}). \quad (2.19)$$

Analog der Rechnung im vorhergehenden Abschnitt ergibt sich

$$G_p^W = \frac{am_0 - r \sum_{\mu} (\cos(ap_{\mu}) - 1) + i\gamma_{\mu} \sin(ap_{\mu})}{\left[am_0 - r \sum_{\mu} (\cos(ap_{\mu}) - 1) \right]^2 + \left[\sum_{\mu} \sin(ap_{\mu}) \right]^2}. \quad (2.20)$$

Die zusätzlichen entarteten Fermionenzustände in den Ecken der Brillouinzone erhalten nun eine im Kontinuumslimites unendlich schwere Masse propotional r/a .

Reskaliert man die fermionischen Felder wie folgt:

$$\psi \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\kappa}} \psi, \quad (2.21)$$

¹ Siehe beispielsweise [27] für eine Anwendung von Ginsparg-Wilson-Fermionen zur Bestimmung des chiralen Kondensats.

so lässt sich die Fermionmatrix für Wilson-Fermionen auch in folgender Form schreiben:

$$M_{xy}^W = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} \left[(r - \gamma_{\mu}) U_{x,\mu} \delta_{x+\hat{\mu},y} + (r + \gamma_{\mu}) U_{x-\hat{\mu},\mu}^{\dagger} \delta_{x-\hat{\mu},y} \right]. \quad (2.22)$$

Der dimensionslose Kopplungsparameter

$$\kappa = \frac{1}{2am_0 + 8r} \quad (2.23)$$

wird „*hopping parameter*“ genannt.

Aufgrund der gebrochenen chiralen Symmetrie muss die Quarkmasse m_q additiv renormiert werden, so dass $m_q = m_0 - m_{0,c}$ ist. $m_{0,c}$ wird kritische Masse genannt. Ausgedrückt durch den Kopplungsparameter κ ergibt sich damit

$$am_q = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c} \right). \quad (2.24)$$

κ_c ist eine Funktion der Eichfeldkopplung g_0^2 . Im freien Fall ($g_0^2 = 0$) ist $\kappa_c = 1/8r$, im wechselwirkenden Fall muss κ_c mit Hilfe der Masse des pseudoskalaren Mesons m_{PS} oder der durch die axiale PCAC-Relation definierten Quarkmasse \hat{m}_q bestimmt werden (siehe Kapitel 5).

Wir werden ab hier ausschließlich vom Fall $r = 1$ ausgehen.

2.5. Die Valenzquark-Approximation

Wir sind nun in der Lage, Erwartungswerte von Produkten bilinearere Kombinationen von Quarkfeldern der Form

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int DU D\psi D\bar{\psi} \mathcal{O} e^{-(S_g + S_f)} \quad (2.25)$$

auf das Gitter zu bringen, wobei

$$\mathcal{O} = \psi(y_1) \bar{\psi}(x_1) \dots \psi(y_n) \bar{\psi}(x_n) \quad (2.26)$$

ist. Formal lässt sich die rechte Seite von Gleichung (2.25) als eine Mittelung über ein statistisches Ensemble mit einer durch $\exp[-(S_g + S_f)]$ gegebenen Boltzmann-Verteilung ansehen. Numerisch lösen lassen sich derartige statistische Probleme beispielsweise mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation. Die Bestimmung eines Erwartungswertes reduziert sich dann auf eine Mittelwertbildung, so dass

$$\langle \mathcal{O} \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}_i \quad (2.27)$$

ist.

Allerdings umfasst Gleichung (2.25) noch eine Integration über Grassmann-wertige Felder. Eine direkte Implementierung von Operationen mit Grassmann-Variablen auf dem Rechner ist zwar möglich, aber für praktische Rechnungen in der QCD zu aufwendig.²

Bei den Integralen über die fermionischen Freiheitsgrade handelt es sich um Gauß'sche Integrale, die formal ausgeführt werden können, so dass

$$\int D\psi D\bar{\psi} e^{-S_f} = (\det M)^{N_f} = \det(M^\dagger M)^{\frac{N_f}{2}} \quad (2.28)$$

ist. M bezeichnet wiederum die Fermionmatrix und N_f die Anzahl verschiedener Fermionspezies („flavours“). Wir haben hier beim ersten Schritt angenommen, dass die verschiedenen Spezies voneinander unabhängig sind, beim zweiten Schritt, dass $\det(M)$ reell und nicht negativ ist.

Gleichung (2.25) lässt sich nun wie folgt schreiben

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int DU \mathcal{O}_f e^{-S_{\text{eff}}} \quad (2.29)$$

wobei

$$\mathcal{O}_f = \sum_{z_1 \dots z_n} \epsilon_{y_1 \dots y_n}^{z_1 \dots z_n} M_{z_1 x_1}^{-1} \dots M_{z_n x_n}^{-1} \quad (2.30)$$

$$\mathcal{Z}_0 = \int DU e^{-S_{\text{eff}}} \quad (2.31)$$

und die effektive Wirkung durch

$$S_{\text{eff}} = S_g - \frac{N_f}{2} \log \det(M^\dagger M) \quad (2.32)$$

gegeben ist. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, diese effektive Wirkung durch eine bosonische Wirkung zu ersetzen. Bei Simulationen der QCD mit einer geraden Anzahl von Fermionspezies wird am häufigsten eine Methode verwendet, bei der jedes fermionische Feld durch ein bosonisches ersetzt wird [29]. Da diese effektive bosonisierte Wirkung nicht lokal ist, bleiben diese Simulationen äußerst aufwendig.³

² Für eine aktuelle Untersuchung eines Algorithmus zur Behandlung von Grassmann-Variablen siehe Creutz [28].

³ Eine Alternative bietet der Multiboson-Algorithmus von Lüscher [30], der von verschiedenen Gruppen weiterentwickelt wurde. Mit diesem Algorithmus ist es im Prinzip möglich, auch Theorien mit einer ungeraden Anzahl von Fermionspezies zu simulieren (siehe [31]).

Eine störungstheoretische Entwicklung von $\det M$ nach Potenzen der Eichfeldkopplung ergibt, dass es sich bei den höheren Termen um geschlossene Fermionenschleifen handelt. Phänomenologische Beobachtungen lassen erwarten, dass diese nur einen kleinen Effekt haben, was die Näherung

$$\det M = \textit{konstant} \quad (2.33)$$

rechtfertigen würde. Diese Näherung ist als Valenzquark-Approximation bekannt [32, 33] und wird auch in dieser Arbeit angewandt.

Dem enormen Gewinn an Rechenzeit steht allerdings gegenüber, dass der Fehler aufgrund dieser Näherung allenfalls schwer kontrollierbar ist. Für leichte Fermionenmassen werden von der chiralen Störungstheorie nicht-analytische Artefakte vorhergesagt, die in der vollen Theorie mit dynamischen Fermionen nicht vorhanden sind. Wir werden im Abschnitt 4.3 darauf zurück kommen. Die QCD auf dem Gitter in der Valenzquark-Approximation ist somit als Modell für die eigentliche QCD auf dem Gitter anzusehen.

2.6. Massen

Massen und Matrixelemente für hadronische Zustände werden aus dem Verhalten von Korrelationsfunktionen bestimmt. Diese sind auf einer Zeitschicht wie folgt definiert:

$$C_{t,\vec{p}}^{\mathcal{O}^{(1)}\mathcal{O}^{(2)}} = \sum_{\vec{x}} e^{-ia\vec{p}\vec{x}} \langle 0 | T \left[\hat{\mathcal{O}}_{\vec{x},t}^{(1)} \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}^{(2)\dagger} \right] | 0 \rangle = \sum_{\vec{x}} e^{-ia\vec{p}\vec{x}} \left\langle \mathcal{O}_{\vec{x},t}^{(1)} \mathcal{O}_{\vec{0},0}^{(2)\dagger} \right\rangle, \quad (2.34)$$

wobei T der Zeitordnungsoperator ist. Durch die partielle Fouriertransformation werden Zustände mit vorgegebenem Impuls \vec{p} herausprojiziert.

Durch Einfügen eines vollständigen Satzes von Eigenzuständen kann die Korrelationsfunktion wie folgt geschrieben werden

$$C_{t,\vec{p}}^{\mathcal{O}^{(1)}\mathcal{O}^{(2)}} = \sum_n \frac{\langle 0 | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}^{(1)} | n, \vec{p} \rangle \langle n, \vec{p} | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}^{(2)\dagger} | 0 \rangle}{2aE_{n,\vec{p}}} e^{-aE_{n,\vec{p}}t} \quad (2.35)$$

Für $t \rightarrow \infty$ wird die Summe von dem Zustand dominiert, der die kleinste Energie aufweist, die wir als Masse des Hadrons identifizieren. Für $\vec{p} = 0$ und $t \rightarrow \infty$ erhalten wir somit

$$C_{t,\vec{0}}^{\mathcal{O}^{(1)}\mathcal{O}^{(2)}} = \frac{\langle 0 | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}^{(1)} | H \rangle \langle H | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}^{(2)\dagger} | 0 \rangle}{2am_H} e^{-am_H t} \quad (2.36)$$

Nach dem Quarkmodell handelt es sich bei Mesonen um gebundene Zustände mit einem Quark q und einem Anti-Quark \bar{q} , wobei es sich bei q und \bar{q} um verschiedene Quarkspezies handeln kann.

Zur Bestimmung der Korrelationsfunktionen von Mesonen sind die Felder $\mathcal{O}^{(i)}$ als bilineare Kombinationen von Quarkfeldern der Form

$$\mathcal{O}_x^{(i)} = \bar{\psi}_x^{(q_1)} \Gamma_i \psi_x^{(q_2)} \quad (2.37)$$

zu wählen. Die Dirac-Matrizen Γ_i sind durch die Quantenzahlen des zu beschreibenden Mesons bestimmt. Eine Übersicht findet sich in Tabelle 2.1.

| Zustand | J^{PC} | Feld |
|--------------|-----------------|---|
| Skalar | 0 ⁺⁺ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \psi_x^{(q_2)}$ |
| | 0 ⁺⁺ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \gamma_4 \psi_x^{(q_2)}$ |
| Pseudoskalar | 0 ⁻⁺ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \gamma_5 \psi_x^{(q_2)}$ |
| | 0 ⁻⁺ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \gamma_4 \gamma_5 \psi_x^{(q_2)}$ |
| Vektor | 1 ⁻⁻ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \gamma_i \psi_x^{(q_2)}$ |
| | 1 ⁻⁻ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \gamma_i \gamma_4 \psi_x^{(q_2)}$ |
| Axialvektor | 1 ⁺⁻ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \gamma_i \gamma_5 \psi_x^{(q_2)}$ |
| | 1 ⁺⁻ | $\bar{\psi}_x^{(q_1)} \gamma_i \gamma_j \psi_x^{(q_2)}$ |

Tabelle 2.1.: Interpolierende Felder für Mesonen. In der mittleren Spalte sind die Quantenzahlen des jeweiligen Zustands für Spin (J), Parität (P) und Ladungskonjugation (C) angegeben. Für die Indizes gilt $i, j \in \{1, 2, 3\}$ und $i \neq j$.

Für das pseudoskalare Meson erhalten wir dann

$$\begin{aligned} C_{t,0}^{PS} &= \sum_{\vec{x}} e^{-ia\vec{p}\vec{x}} \langle 0 | T \left[\bar{\psi}_{\vec{x},t}^{(q_1)} \gamma_5 \psi_{\vec{x},t}^{(q_2)} \left(\bar{\psi}_{\vec{0},0}^{(q_1)} \gamma_5 \psi_{\vec{0},0}^{(q_2)} \right)^\dagger \right] | 0 \rangle \\ &= - \sum_{\vec{x}} e^{-ia\vec{p}\vec{x}} \langle 0 | T \left[\bar{\psi}_{\vec{x},t}^{(q_1)} \gamma_5 \psi_{\vec{x},t}^{(q_2)} \bar{\psi}_{\vec{0},0}^{(q_2)} \gamma_5 \psi_{\vec{0},0}^{(q_1)} \right] | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\vec{x}} e^{-ia\vec{p}\vec{x}} \left\langle \text{Tr} \left(G_{0,x}^{(q_1)} \gamma_5 G_{x,0}^{(q_2)} \gamma_5 \right) \right\rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\vec{x}} e^{-ia\vec{p}\vec{x}} \left\langle \text{Tr} \left(G_{0,x}^{(q_1)} G_{0,x}^{(q_2)\dagger} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (2.38)$$

wobei Tr sowohl die Spur über den Farb- als auch den Spinorindizes angibt. Im vorletzten Schritt haben wir ausgenutzt, dass die Propagatoren die Gleichung

$$G_{x,0}^\dagger = \gamma_5 G_{0,x} \gamma_5 \quad (2.39)$$

erfüllen.

Gleichung (2.36) gilt in dieser Form nur, wenn das Gitter in zeitlicher Richtung unendlich ausgedehnt ist, d.h. für $T \rightarrow \infty$. Für eine endliche Ausdehnung T und anti-periodische Randbedingungen in zeitlicher Richtung ist zu berücksichtigen, dass die Mesonen auch in negativer Zeitrichtung propagieren. Somit ist für $t \rightarrow \infty$ und $(T - t) \rightarrow \infty$

$$C_{t,\vec{0}}^{\mathcal{O}^{(1)}\mathcal{O}^{(2)}} = \frac{1}{2am_H} \left[\langle 0 | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}^{(1)} | H \rangle \langle H | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}^{(2)\dagger} | 0 \rangle e^{-am_H t} + \right. \quad (2.40)$$

$$\left. \langle 0 | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}'^{(2)} | H \rangle \langle H | \hat{\mathcal{O}}_{\vec{0},0}'^{(1)\dagger} | 0 \rangle e^{-am_H(T-t)} \right]$$

$$= A_{\mathcal{O}^{(1)}\mathcal{O}^{(2)}} \left[e^{-am_H t} + \epsilon_1 \epsilon_2 e^{-am_H(T-t)} \right] \quad (2.41)$$

$$= \begin{cases} 2A_{\mathcal{O}^{(1)}\mathcal{O}^{(2)}} e^{-am_H T/2} \cosh \left[m_H \left(\frac{T}{2} - t \right) \right], & \epsilon_1 \epsilon_2 = +1 \\ 2A_{\mathcal{O}^{(1)}\mathcal{O}^{(2)}} e^{-am_H T/2} \sinh \left[m_H \left(\frac{T}{2} - t \right) \right], & \epsilon_1 \epsilon_2 = -1, \end{cases}$$

wobei $\hat{\mathcal{O}}'^{(i)} = \epsilon_i \hat{\mathcal{O}}^{(i)}$ ist. $\epsilon_i = \pm 1$ gibt an, wie sich der Operator unter Zeitumkehr verhält und ist definiert durch

$$\mathcal{T} \Gamma_i \mathcal{T}^{-1} = \epsilon_i \Gamma_i, \quad (2.42)$$

wobei der Zeitumkehroperator in der von uns verwendeten Darstellung $\mathcal{T} = \gamma_4$ ist.

Baryonen sind aus Kombinationen von drei Quarks aufgebaut. Die leichten Baryonen, die aus den u-, d- und s-Quarks bestehen, bilden zwei SU(3) Multipletts, das Baryondekuplett mit Spin $J = \frac{3}{2}$ und das Baryonoktett mit $J = \frac{1}{2}$. Letzteres ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Wir werden uns im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich mit den Baryonen dieses Oktetts, für die die dritte Komponente des Isospins $I_3 \neq 0$ ist, und mit deren negativem Paritätspartner befassen.

Es gibt zwei Möglichkeiten, Baryonen mit $J^P = \frac{1}{2}^+$ auf das Gitter zu bringen.⁴ Wir verwenden hier als interpolierendes Feld [35]

$$B_{\alpha,x} = \epsilon^{abc} \psi_{\alpha,x}^{(q_1)a} \left[\psi_{\beta,x}^{(q_1)b} \tilde{\mathcal{C}}_{\beta\gamma} \psi_{\gamma,x}^{(q_2)c} \right], \quad (2.43)$$

wobei für die Farbindizes römische und für die Spinorindizes griechische Buchstaben verwendet wurden. Ferner ist $\tilde{\mathcal{C}} = \mathcal{C}\gamma_5$, wobei \mathcal{C} die Ladungsinversionsmatrix ist. Wir haben $\mathcal{C} = \gamma_4\gamma_2$ verwendet. Für das Proton ist $q_1 = u$ und $q_2 = d$. Die Zuordnung für die anderen Baryonen lässt sich der Abbildung 2.2 entnehmen.

Die Korrelationsfunktion für das Baryon ist dann wie folgt definiert:

$$C_{t,\vec{p}}^{B(\pm)} = \sum_{\vec{x}} e^{-ia\vec{p}\vec{x}} \Gamma_{\alpha'\alpha}^{(\pm)} \langle 0 | T [B_{\alpha,x} \bar{B}_{\alpha',0}] | 0 \rangle. \quad (2.44)$$

⁴ Für eine Diskussion beider Möglichkeiten siehe [34].

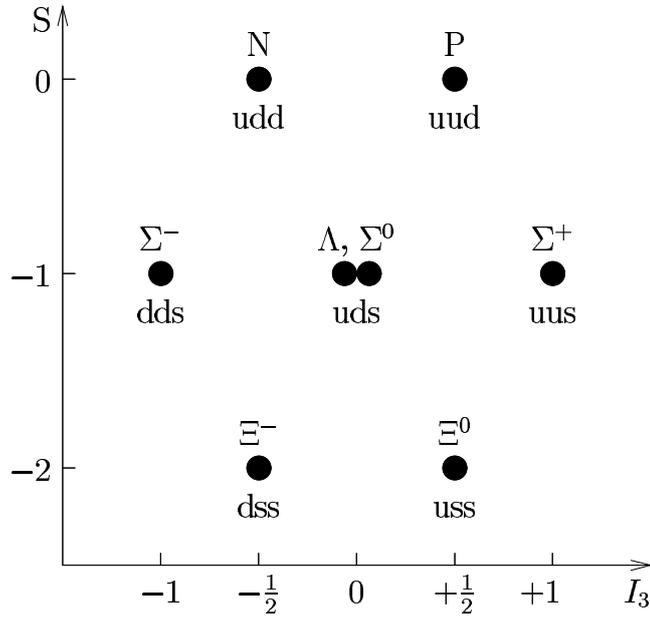


Abbildung 2.2.: Das Baryonoktett als Funktion der dritten Komponente des Isospins I_3 und Seltsamkeit S .

Da das Feld $B_{\alpha,x}$ sowohl an Zustände positiver wie negativer Parität koppelt, benötigen wir die Matrix

$$\Gamma^{(\pm)} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_4), \quad (2.45)$$

um die Zustände positiver (+) bzw. negativer Parität (-) heraus zu projizieren.

Für $t > 0$ und $\vec{p} = 0$ erhalten wir dann⁵

$$\begin{aligned} C_{t,\vec{0}}^{B^{(\pm)}} &= \sum_{\vec{x}} \Gamma_{\alpha'\alpha}^{(\pm)} \epsilon^{abc} (-\epsilon^{a'b'c'}) \tilde{\mathcal{C}}_{\beta\gamma} \tilde{\mathcal{C}}_{\gamma'\beta'} \quad (2.46) \\ &\quad \langle 0 | \psi_{\alpha,x}^{(q_1)a} \psi_{\beta,x}^{(q_1)b} \psi_{\gamma,x}^{(q_2)c} \bar{\psi}_{\gamma',0}^{(q_2)c'} \bar{\psi}_{\beta',0}^{(q_1)b'} \bar{\psi}_{\alpha',0}^{(q_1)a'} | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\vec{x}} \epsilon^{abc} (-\epsilon^{a'b'c'}) \left[\Gamma_{\alpha'\alpha}^{(\pm)} G_{x,0;\alpha\beta'}^{(q_1)ab'} \tilde{\mathcal{C}}_{\beta\gamma} G_{x,0;\gamma\gamma'}^{(q_2)cc'} \tilde{\mathcal{C}}_{\gamma'\beta'} G_{x,0;\beta\alpha'}^{(q_1)ba'} - \right. \\ &\quad \left. \Gamma_{\alpha'\alpha}^{(\pm)} G_{x,0;\alpha\alpha'}^{(q_1)aa'} \tilde{\mathcal{C}}_{\beta\gamma} G_{x,0;\gamma\gamma'}^{(q_2)cc'} \tilde{\mathcal{C}}_{\gamma'\beta'} G_{x,0;\beta\beta'}^{(q_1)bb'} \right] \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\vec{x}} \epsilon^{abc} \epsilon^{a'b'c'} \left[\text{tr} \left[\Gamma^{(\pm)} G_{x,0}^{(q_1)aa'} (\tilde{\mathcal{C}} G_{x,0}^{(q_2)bb'} \tilde{\mathcal{C}}^{-1})^T G_{x,0}^{(q_1)cc'} \right] + \right. \\ &\quad \left. \text{tr} \left[\Gamma^{(\pm)} G_{x,0}^{(q_1)aa'} \right] \text{tr} \left[(\tilde{\mathcal{C}} G_{x,0}^{(q_2)bb'} \tilde{\mathcal{C}}^{-1})^T G_{x,0}^{(q_1)cc'} \right] \right]. \end{aligned}$$

⁵ Die Rechnung für $\vec{p} \neq 0$ erfolgt analog dem mesonischen Fall.

Die Spurbildung und das Transponieren erfolgt hier nur bezüglich der Spinorindizes.

Für $0 \ll t \ll T$ und $T \rightarrow \infty$ erwarten wir wiederum, dass $C_{t,\vec{0}}^B$ vom Grundzustand dominiert wird. Allerdings ist die Wellenfunktion des Baryons nicht symmetrisch unter Zeitumkehr. Wir erhalten nun aufgrund der (anti-)periodischen Randbedingungen einen zweiten Zustand mit umgekehrter Parität, welcher eine andere Masse hat, so dass

$$\begin{aligned} C_{t,\vec{0}}^B &= C_{t,\vec{0}}^{B(+)} + C_{T-t,\vec{0}}^{B(-)} \\ &\simeq A_+ e^{-am_{B^+}t} + A_- e^{-am_{B^-}(T-t)}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Für das Nukleon identifizieren wir den zweiten Zustand mit dem $N^*(1535)$ mit $I(J^P) = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}^-)$.⁶

2.7. Zerfallskonstanten

Die Zerfallskonstante des pseudoskalaren Mesons ist im Kontinuum definiert als

$$\langle 0 | A_\mu(0) | \text{PS}(\vec{p}) \rangle = i p_\mu f_{\text{PS}}, \quad (2.48)$$

wobei A_μ der Axialvektorstrom ist. Experimentell kann diese Größe mit Hilfe der Zerfallsbreite Γ der leptonischen Zerfälle, beispielsweise des π^\pm , bestimmt werden:

$$\Gamma \left(\begin{array}{l} \pi^\pm \rightarrow l^\pm + \bar{\nu}_l \\ \pi^\pm \rightarrow l^\pm + \bar{\nu}_l + \gamma \end{array} \right) = (G V_{11} f_\pi)^2 \frac{m_\pi m_l^2}{8\pi} \left(1 - \frac{m_l^2}{m_\pi^2} \right)^2, \quad (2.49)$$

wobei G die Fermi-Konstante und V_{11} ein Element der Cabibbo-Kobayashi-Maskawa-Matrix ist. Aus den Zerfallsprozessen $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \bar{\nu}_\mu$ und $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \bar{\nu}_\mu + \gamma$ kann so der Wert $f_{\pi^+} = 130.7(5)$ [37] ermittelt werden. Auf dem Gitter ist die Zerfallskonstante für $\vec{p} = 0$ definiert durch

$$\langle 0 | A_4 | \text{PS}(\vec{0}) \rangle = m_{\text{PS}} f_{\text{PS}}. \quad (2.50)$$

Bei der Zerfallskonstante des Vektormesons werden wir auf dem Gitter die Definition

$$\langle 0 | V_\mu | \text{V}(\vec{0}, \lambda) \rangle = \epsilon_\mu^{(\lambda)} \frac{m_{\text{V}}^2}{f_{\text{V}}} \quad (2.51)$$

verwenden, wobei $\epsilon_\mu^{(\lambda)}$ ein Polarisationsvektor ist. Dieser erfüllt die Bedingung $\sum_\lambda \epsilon_\mu^{(\lambda)*} \epsilon_\mu^{(\lambda)} = 1$. f_{V} ist nach dieser Definition dimensionslos.

⁶ Für eine Untersuchung des positiven Paritätspartners des Nukleons, des $N'(1440)$, siehe [36].

Die Zerfallskonstante f_{AV} kann für das Axialvektormeson a_1 experimentell durch den Zerfall des τ Leptons bestimmt werden, bei dem dieses im Prozess $\tau \rightarrow \nu_\tau a_1 \rightarrow \nu_\tau \rho \pi \rightarrow \nu_\tau \pi \pi \pi$ in drei Pionen zerfällt. Die Zerfallskonstante ergibt sich dann aus dem $W \rightarrow a_1$ Vertex als [38]

$$\Gamma^{\mu\nu}(W \rightarrow a_1) = -i f_{a_1}(p^2) g^{\mu\nu}. \quad (2.52)$$

Auf dem Gitter werden wir für Impuls $\vec{p} = 0$ die Zerfallskonstante des Axialvektormesons f_{AV} wie folgt definieren:

$$\langle 0 | A_i | AV(\vec{0}, \lambda) \rangle = \epsilon_i^{(\lambda)} m_{AV}^2 f_{AV}, \quad (2.53)$$

wobei f_{AV} dimensionslos ist.

2.8. $O(a)$ Verbesserung

Durch den zusätzlichen, die chirale Symmetrie im masselosen Fall brechenden Term in der Wirkung für Wilson-Fermionen, der proportional a ist, verschwinden die Diskretisierungsfehler beim Übergang zum Kontinuum ebenfalls proportional a . Dies ist wesentlich schlechter als bei den „naiven“ und den Kogut-Susskind-Fermionen, die beide einen Diskretisierungsfehler $O(a^2)$ haben.⁷

Ein Programm zur systematischen Korrektur der Diskretisierungsfehler für Größen auf der Massenschale (beispielsweise Massen und Zerfallskonstanten) wurde von Symanzik [10, 11] entwickelt (wir folgen hier der Darstellung in [39]). Die diskretisierte Wirkung lässt sich bei kleinen Energien als eine effektive Wirkung der Form

$$S_{\text{eff}} = \int d^4x [\mathcal{L}_0(x) + a\mathcal{L}_1(x) + a^2\mathcal{L}_2(x) + \dots] \quad (2.54)$$

auffassen. $\mathcal{L}_0(x)$ ist die Lagrange-Dichte im Kontinuum, während $\mathcal{L}_k(x)$ ($k \geq 1$) aus Linearkombinationen lokaler Operatoren der Dimension $4 + k$ besteht. Wir beschränken uns hier auf $\mathcal{L}_1(x)$ und vernachlässigen alle Terme, die beim Übergang zum Kontinuumsimes schneller verschwinden. Berücksichtigt man die Symmetrien der Wirkung auf dem Gitter, kann $\mathcal{L}_1(x)$ als

⁷ Für Domain-Wall-Fermionen erwartet man einen Diskretisierungsfehler $O(a) \exp(-cN_s)$, wobei N_s die Ausdehnung des Gitters in der fünften Dimension ist.

Linearkombination der folgenden Felder geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{O}_1 &= \bar{\psi} i\sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \psi \\
 \mathcal{O}_2 &= \bar{\psi} D_\mu D_\mu \psi + \bar{\psi} \overleftarrow{D}_\mu \overleftarrow{D}_\mu \psi \\
 \mathcal{O}_3 &= m \operatorname{tr}(F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}) \\
 \mathcal{O}_4 &= \bar{\psi} m (\bar{\psi} \gamma_\mu D_\mu \psi - \bar{\psi} \overleftarrow{D}_\mu \gamma_\mu \psi) \\
 \mathcal{O}_5 &= m^2 \bar{\psi} \psi
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Analog zur Wirkung können die renormierten Felder auf dem Gitter in ähnlicher Form dargestellt werden:

$$\phi_{\text{eff}} = \phi_0 + a\phi_1 + a^2\phi_2 + \dots, \tag{2.56}$$

wobei die Felder ϕ_i die geeignete Dimension haben und unter Symmetrieoperationen auf dem Gitter in gleicher Weise transformieren müssen. Betrachten wir beispielsweise den Axialvektorstrom

$$A_\mu = \bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_5 \psi, \tag{2.57}$$

so ist ϕ_1 gegeben durch Linearkombinationen von

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{O}_6)_\mu &= \bar{\psi} \gamma_5 \frac{1}{2} \sigma_{\mu\nu} [\overrightarrow{D}_\nu - \overleftarrow{D}_\nu] \psi \\
 (\mathcal{O}_7)_\mu &= \bar{\psi} \frac{1}{2} \gamma_5 [\overrightarrow{D}_\mu + \overleftarrow{D}_\mu] \psi \\
 (\mathcal{O}_8)_\mu &= m \bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_5 \frac{1}{2} \psi.
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

Die Zahl der Operatoren $\mathcal{O}_1 \dots \mathcal{O}_8$ lässt sich jedoch reduzieren, wenn man die Feldgleichungen anwendet und berücksichtigt, dass sich einige Operatoren als Linearkombinationen anderer schreiben lassen. So ist

$$\mathcal{O}_1 - \mathcal{O}_2 + 2\mathcal{O}_5 = 0 \quad \text{und} \quad \mathcal{O}_4 + 2\mathcal{O}_5 = 0. \tag{2.59}$$

Die Lagrange-Dichte \mathcal{L}_1 lässt sich somit als Linearkombination von \mathcal{O}_1 , \mathcal{O}_3 und \mathcal{O}_5 schreiben. Die Terme in der effektiven Wirkung S_{eff} proportional a können somit eliminiert werden, indem man einen Korrekturterm der Form

$$\Delta S = a^5 \sum_x (c_1 \mathcal{O}_{1,x} + c_3 \mathcal{O}_{3,x} + c_5 \mathcal{O}_{5,x}) \tag{2.60}$$

subtrahiert. Da die Felder $\mathcal{O}_{3,x}$ und $\mathcal{O}_{5,x}$ bereits in der diskretisierten Wirkung der QCD mit Wilson-Fermionen enthalten sind, kann diese Änderung

der Wirkung durch den Korrekturterm in eine Redefinition der nackten Koppelungsparameter absorbiert werden, so dass

$$\tilde{g}_0^2 = (1 + b_g a m_q) g_0^2 \quad (2.61)$$

$$\tilde{m}_q = (1 + b_m a m_q) m_q \quad (2.62)$$

ist.

Wir erhalten somit die folgende $O(a)$ -verbesserte Wirkung:

$$S_f^{\text{SW}} = S_f^{\text{W}} + a^5 \frac{i g_0 c_{\text{sw}}}{4} \sum_x \bar{\psi}_x \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu,x} \psi_x, \quad (2.63)$$

wobei S_f^{W} die in Gleichung (2.18) definierte fermionische Wilson-Wirkung bezeichnet. Die Wirkung wurde in dieser Form erstmals von Sheikholeslami und Wohlert [40] veröffentlicht. Sie wurde daher unter dem Namen „*Sheikholeslami-Wohlert-Wirkung*“ oder „*clover action*“ bekannt. Der letztere Name ist auf die in Abbildung 2.3 wiedergegebene graphische Darstellung des Terms $\sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu,x}$ zurückzuführen.

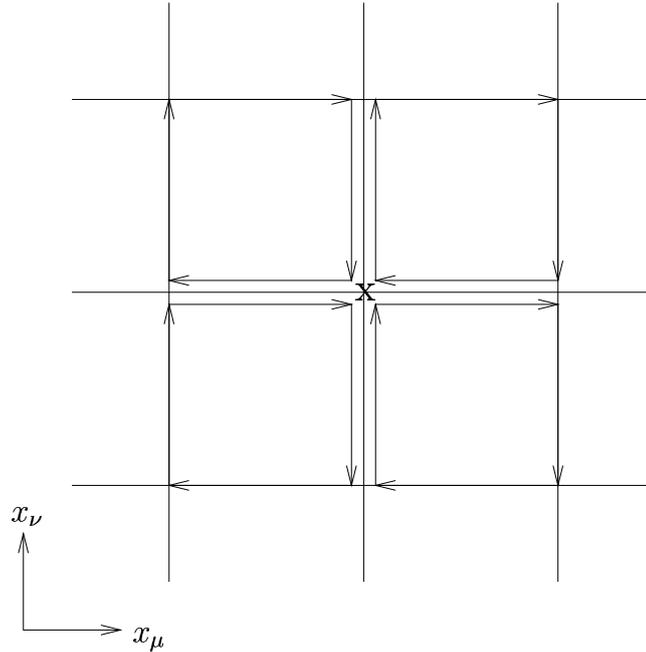


Abbildung 2.3.: Graphische Darstellung des Verbesserungsterms der Sheikholeslami-Wohlert-Wirkung S^{SW} .

Um alle Terme $O(a)$ in der Wirkung zu entfernen, muss allerdings der Koeffizient c_{sw} geeignet gewählt werden. Die ALPHA-Kollaboration [41] hat

c_{sw} nicht-störungstheoretisch bestimmt. Als Kriterium für die Verbesserung wurde dabei gewählt, dass die PCAC-Relation

$$\partial_\mu A_\mu = 2mP \quad (2.64)$$

bis auf Korrekturen $O(a^2)$ erfüllt ist. A_μ bezeichnet hier den Axialvektorstrom, P die pseudoskalare Dichte und m die Quarkmasse. Die so bestimmten numerischen Ergebnisse für c_{sw} werden gut durch folgenden rationalen Ausdruck beschrieben

$$c_{\text{sw}} = \frac{1 - 0.656g_0^2 - 0.152g_0^4 - 0.054g_0^6}{1 - 0.922g_0^2}, \quad (2.65)$$

wobei $0 \leq g_0 \leq 1$ zu wählen ist.⁸ Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen haben wir die Sheikholeslami-Wohlert-Wirkung verwendet, wobei c_{sw} mit Hilfe von Gleichung (2.65) bestimmt wurde.

Neben dem Verbesserungsprogramm nach Symanzik gibt es ein weiteres, welches auf Hasenfratz und Niedermayer [43] zurückgeht. Diese hatten vorgeschlagen, „perfekte Gitterwirkungen“ durch eine „klassisch perfekte Wirkung“ zu approximieren.⁹ Nicht zuletzt wegen des beträchtlichen numerischen Aufwands, der mit diesen Wirkungen verbunden ist, hat sich dieser Ansatz in der Praxis nicht durchgesetzt.

⁸ Eine Erweiterung auf den Bereich $\beta = 6/g_0^2 \geq 5.7$ erfolgte durch Edwards, Heller und Klassen [42].

⁹ Für eine Übersicht siehe [44].