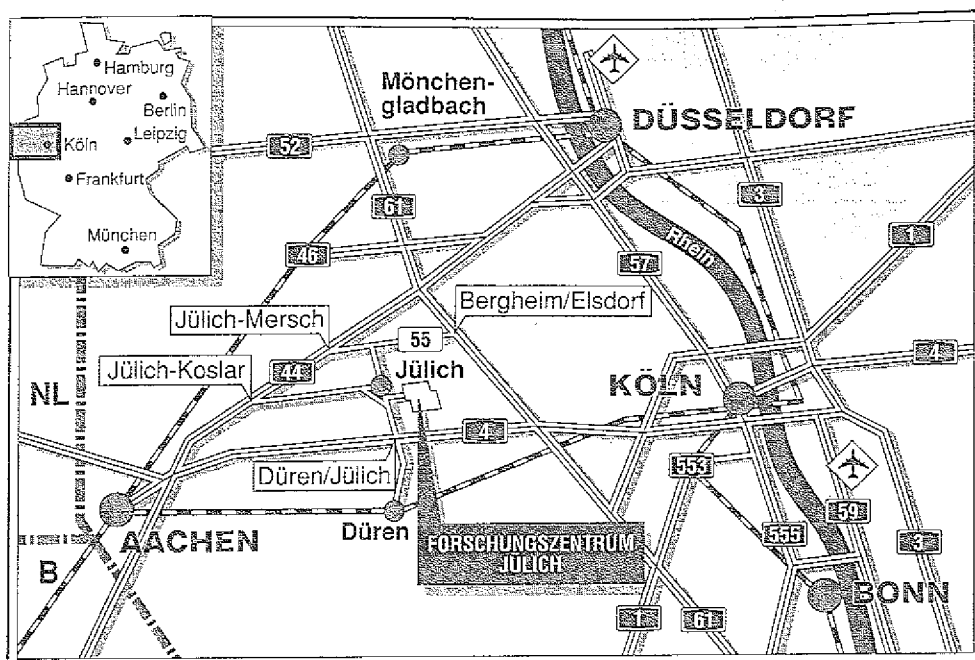


Institut für Festkörperforschung

**Eigenschaften der $O(4)$ -symmetrischen
 Φ^4 -Theorie auf 4dimensionalen Gittern
in der gebrochenen Phase**

Frank Zimmermann



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2781

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Jül-2781

D 82 (Diss. RWTH Aachen)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

Postfach 1913 · D-5170 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

1. The first part of the paper discusses the importance of the study of the history of the United States. It is argued that a knowledge of the past is essential for a full understanding of the present and for the development of a sound policy for the future. The author points out that the study of history is not only a means of satisfying a natural curiosity about the past, but also a means of training the mind in the habits of logical and critical thinking.

2. The second part of the paper discusses the importance of the study of the history of the United States. It is argued that a knowledge of the past is essential for a full understanding of the present and for the development of a sound policy for the future. The author points out that the study of history is not only a means of satisfying a natural curiosity about the past, but also a means of training the mind in the habits of logical and critical thinking.

3. The third part of the paper discusses the importance of the study of the history of the United States. It is argued that a knowledge of the past is essential for a full understanding of the present and for the development of a sound policy for the future. The author points out that the study of history is not only a means of satisfying a natural curiosity about the past, but also a means of training the mind in the habits of logical and critical thinking.

Eigenschaften der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie auf 4dimensionalen Gittern in der gebrochenen Phase

Frank Zimmermann

1. The first part of the paper is devoted to the study of the properties of the function $f(x)$ defined by the equation

$$f(x) = \int_0^x \frac{1}{1+t^2} dt.$$

The function $f(x)$ is defined for all real values of x and is continuous. It is also differentiable for all x and its derivative is given by the formula

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
1.1	Problemfeld im ersten Teil	10
1.2	Problemfeld im zweiten Teil	12
1.3	Gliederung der Arbeit	12
I	Volumeneffekte, Skalenverhalten & Regularisierungsabhängigkeit	15
2	Vom Standard-Modell zur $O(4)$-symmetrischen Φ^4-Theorie	17
2.1	Standard-Modell	17
2.2	Spontane Symmetriebrechung und Higgs-Mechanismus	19
2.3	Trivialität der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie	22
3	Die Φ^4-Theorie auf dem Gitter	25
3.1	Pfadintegralquantisierung	26
3.2	Die Euklidische Wirkung auf dem Gitter	27
3.3	Das Konzept der verbesserten Wirkungen	30
3.4	Die analytische „Lösung“ der Φ^4 -Theorie von Lüscher und Weisz	33
4	Numerische Methoden	37
4.1	Grundlagen	37
4.2	Clusteralgorithmus	40
4.2.1	Einbettung	40
4.2.2	Aufdatierung	41
4.2.3	Iterationsschritte des Algorithmus	42
4.2.4	Suchalgorithmen	43
4.3	Verteilungen und Histogramm-Methode	44
4.3.1	Doppel-Verteilung von Magnetisierung und Energie	44
4.3.2	Histogramm-Methode	47
4.4	Numerische Ergebnisse zu den Verteilungen	49

5	Berücksichtigung der Effekte des endlichen (Gitter)-Volumens	53
5.1	Effektive Feldtheorien und Volumeneffekte	54
5.2	Volumenabhängigkeit in der chiralen Störungstheorie	61
5.2.1	Chirale Störungstheorie für die spontan gebrochene $O(N)$ Symmetrie	61
5.2.2	Volumenabhängigkeit der untersuchten Größen	65
5.3	Volumenabhängigkeit in renormierter Störungstheorie	66
5.3.1	Das eingeschränkte effektive Potential	67
5.3.2	Effektive Observable und eingeschränkte Korrelationsfunktionen	69
5.3.3	Sattelpunktentwicklung des effektiven Potentials	70
5.3.4	1-Schleifen renormierte Störungstheorie	72
5.3.5	Renormierung	73
5.3.6	Chirale versus renormierte Störungstheorie	78
5.4	Methoden zu Bestimmung von Σ , Z und m_σ	79
5.4.1	Bestimmung von Z	79
5.4.2	Bestimmung von Σ	81
5.4.3	Bestimmung von m_σ	82
5.4.4	Versagen der chiralen Störungstheorie	84
5.4.5	Systematische Fehler aufgrund der Vernachlässigung höherer Schleifenordnungen	86
5.5	Numerische Ergebnisse zur Untersuchung der Volumenabhängigkeit	86
6	Untersuchung des Skalenverhaltens	91
6.1	Renormierungsgruppen-Gleichungen	91
6.2	Numerische Ergebnisse zur Untersuchung des Skalenverhaltens	95
6.3	Vergleich mit den analytischen Vorhersagen	99
7	Regularisierungsabhängigkeit der oberen Schranke für die Higgs-Boson-Masse	101
7.1	Numerische Ergebnisse zur Untersuchung der oberen Schranke für die Higgs-Masse	101
7.2	Kriterien zum Vergleich der Regularisierungen	104
7.2.1	Wirkungsquerschnitt der Goldstone-Boson-Streuung	105
7.2.2	Verletzung der Rotationssymmetrie	109
7.3	Zusammenfassung zum ersten Teil	110
II	Instabile Teilchen	113
8	Instabile Teilchen im endlichen Volumen	115

8.1	Heuristisches zu Volumeneffekten	117
8.2	Streuphasen und Zwei-Teilchen-Zustände	118
8.2.1	Die Formulierung in 1+1 Dimensionen	119
8.2.2	Die Formulierung in 3+1 Dimensionen	121
8.2.3	Zur Formulierung in anderen Dimensionen	126
8.3	Streuphasen in der $O(4)$ - Φ^4 -Theorie	127
8.3.1	Kinematische Betrachtungen zur Pion-Streuung	127
8.3.2	Störungstheoretische Ergebnisse zur Pion-Streuung	128
8.4	Wahl der Simulationsparameter	131
9	Energiespektren im endlichen Volumen	133
9.1	Berechnung der Pion-Masse und des 1-Teilchen-Energiespektrums . .	133
9.2	Wie wird das 2-Teilchen-Energiespektrum gemessen?	137
9.2.1	2-Teilchen-Operatoren	138
9.2.2	Auswahl der 2-Teilchen-Wellenfunktion	138
9.2.3	Korrelationsfunktionsmatrix	139
9.3	Details zu den numerischen Simulationen	142
9.4	Analyse des 2-Teilchen-Energiespektrums	144
9.5	Numerische Ergebnisse zum 2-Teilchen-Energiespektrum	148
9.5.1	Das gemessene 2-Teilchen-Energiespektrum	150
9.5.2	Die Qualität der Wellenfunktionen	153
9.5.3	Streulängen	154
10	Die Streuphasen und die σ-Resonanz	161
10.1	Numerische Ergebnisse zur Untersuchung der Streuphasen	161
10.2	Zusammenfassung zum zweiten Teil	169
A	Ergodizität und detailliertes Gleichgewicht	171
B	Sattelpunktentwicklung	175
C	Volumenkorrekturen	177
C.1	Eigenschaften der Funktionen $\bar{g}_r(mL)$	177
C.2	Diskussion der Gittereffekte	184
D	Renormierungsgruppen-Gleichungen	187
E	Zeta-Funktion	189

Kurzzusammenfassung

TEIL I

Im ersten Teil der Arbeit wird die $O(4)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie im Skalenbereich der gebrochenen Phase auf endlichen Gittern untersucht. Dabei wird die Standard- und eine im Sinne Symanzikis verbesserte Gitter-Wirkung bei unendlicher nackter Selbstkopplung des Φ -Feldes verwendet. Unter Benutzung des Clusteralgorithmus wird eine Monte-Carlo-Simulation mit sehr hoher Präzision durchgeführt. Um die bei einigen festen Werten des Kopplungsparameters κ (engl. *hopping-Parameter*) erhaltenen Daten zu benachbarten κ -Werten analytisch fortzusetzen, wird die sogenannte Histogramm-Methode verwendet. Die Effekte des endlichen Gittervolumens, beispielsweise bei der Bestimmung des Felderwartungswertes Σ und der Masse m_σ des σ -Teilchens können sehr gut durch renormierte Störungstheorie in der 1-Schleifen-Näherung beschrieben werden. Anschließend wird eine Skalen-Analyse durchgeführt, die u.a. auch das Studium der logarithmischen Korrekturen zur Molekularfeld-Näherung einschließt.

Zum Abschluß des ersten Teils wird die Regularisierungsabhängigkeit der oberen Schranke für die Higgs-Boson-Masse in den beiden hier untersuchten Gitter-Regularisierungen diskutiert. Unter physikalisch plausiblen Annahmen ergibt sich hieraus – in Konsistenz mit Ergebnissen anderer Gruppen – eine obere Schranke für die Masse des Higgs-Bosons von 710 ± 40 GeV, bis zu der das Higgs-Boson gefunden sein bzw. die Gültigkeit des minimalen Standard-Modells in Frage gestellt werden muß.

TEIL II

Nach einem Vorschlag von Lüscher können elastische Streuphasen in massiven Quantenfeldtheorien aus der Volumenabhängigkeit des Spektrums von 2-Teilchen-Zuständen berechnet werden. Im zweiten Teil dieser Arbeit wird die Anwendbarkeit dieser Methode am Beispiel des nichtlinearen $O(4)$ - σ -Modelles in 4 Dimensionen mittels Monte-Carlo-Simulationen auf endlichen Gittern demonstriert. Dabei muß die $O(4)$ -Symmetrie durch Einführung einer äußeren Quelle j explizit gebrochen werden, um so den Goldstone-Bosonen eine nichtverschwindende Masse zu geben. Dieses Verfahren zur Bestimmung der Streuphasen ermöglicht (erstmalig in 4dimensionalen Modellen) auch die nicht-perturbative MC-Untersuchung instabiler Teilchen, in diesem Fall des σ -Teilchens. Es ist gelungen, die Masse m_σ und die Zerfallsbreite Γ_σ der σ -Resonanz auf diesem Weg zu messen.

Die erhaltenen Ergebnisse sind konsistent mit störungstheoretischen Rechnungen: Die Werte für die Zerfallsbreite stimmen sehr gut mit den Vorhersagen aus der Störungstheorie in der 1-Schleifen-Näherung überein. Erwartungsgemäß liegen die Werte der Resonanzmasse (für den untersuchten Parameterbereich ca. 5 %) unterhalb der Schätzwerte aus einem Fit an den σ -Propagator im Impulsraum. Damit ist die Anwendbarkeit des Lüscherischen Verfahrens zur Untersuchung der Teilchenstreuung auf endlichen Gittern bewiesen.

Kapitel 1

Einleitung

Daß ich erkenne, was die Welt
Im Innersten zusammenhaelt.

Goethe: *Faust, der Tragödie erster Teil*

Ziel der Elementarteilchenphysik ist, die Vielzahl der heute bekannten Grundbausteine der Materie aus möglichst wenigen fundamentalen Teilchen zusammenzusetzen – deshalb elementar – und die zugrundeliegenden Wechselwirkungen dieser Teilchen idealerweise in einer Theorie zu vereinheitlichen. Als fundamental werden Teilchen angesehen, die bis zu einem bestimmten Auflösungsvermögen „punktförmig“ und strukturlos sind. Derzeit beträgt das experimentell erreichbare Auflösungsvermögen ca. 10^{-17} cm. Bei diesen Abständen, geht man davon aus, daß eine Quantentheorie der Gravitation noch keine Rolle spielt, da die relevante Längenskala, die Planck-Länge, den Wert $1.61 \cdot 10^{-33}$ cm hat.

Zwei Quantenfeldtheorien für fundamentale Teilchen, die sich auf die Prinzipien der speziellen Relativitäts- und der Quantentheorie stützen, bilden nach heutigem Wissensstand das Standard-Modell der Elementarteilchenphysik: die Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung, die in Form des Glashow-Salam-Weinberg-Modells eine einheitliche Beschreibung von Elektromagnetismus und schwacher Wechselwirkung liefert [9], und die Quantenchromodynamik (QCD), die Theorie der starken Wechselwirkung [7].

Diese Feldtheorien lassen vom Raum-Zeit-Punkt abhängige Symmetrietransformationen – sogenannte lokale Eichtransformationen – zu [1]. Das Standard-Modell ist eine $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ -Eichfeldtheorie mit zugehörigen Ladungen, in der die unter lokalen $SU(3)$ -Eichtransformationen invariante QCD und die elektroschwache Wechselwirkung – auf der Basis der $SU(2) \times U(1)$ -Eichgruppe – miteinander verknüpft sind.

Im Standard-Modell lassen sich die Konstituenten der Materie, fermionische Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$, nach ihren Quantenzahlen in drei Generationen von Leptonen und Quarks einteilen. Die Kraft zwischen geladenen Teilchen wird durch Vektorbosonen (mit Spin 1) übertragen. Durch die Einführung eines skalaren Feldes, des sogenannten Higgs-Feldes, mit nichtverschwindendem Vakuumerwartungswert wird eine spontane Symmetriebrechung induziert, die mit einem Phasenübergang des Systems zusammenhängt. Spontane Symmetriebrechung bedeutet, daß der Grundzustand nicht

mehr die Symmetrie der Wirkung besitzt (im Gegensatz zu einer expliziten Symmetriebrechung). In der Glashow–Salam–Weinberg–Theorie wird unter Erhaltung der Renormierbarkeit die $SU(2) \times U(1)$ spontan zur $U(1)_{em}$ -Eichgruppe der Quantenelektrodynamik gebrochen. Im Rahmen des Higgs-Mechanismus [6] wurden die Massen der $W^\pm$ - und Z -Eichbosonen vorhergesagt. Die Entdeckung dieser Teilchen wurde als einer der aufsehenerregendsten physikalischen Erfolge dieser Theorie gefeiert [22].

Zwar gibt es bisher keinerlei Anzeichen für signifikante Abweichungen vom Standard-Modell, jedoch fehlt bisher noch der experimentelle Nachweis des Higgs-Bosons, und damit die Bestätigung für die Richtigkeit des Higgs-Mechanismus zur Massenerzeugung. Die Masse des Higgs-Bosons tritt als freier Parameter in der Glashow–Salam–Weinberg–Theorie auf und es können derzeit nur untere bzw. obere Schranken angegeben werden. Eine untere Grenze wird aus Konsistenzüberlegungen zum Minimum des effektiven Potentials (Vakuumstabilität) abgeleitet [15, 16]. Eine weitere untere Schranke in der Höhe von ca. 60 GeV ergibt sich aus der bisher erfolglosen experimentellen Suche [5, 12]. Obere Grenzen für die Masse des Higgs-Bosons, die aus Unitaritätsüberlegungen und aus der Trivialitätseigenschaft (des skalaren Sektors) des Standard-Modells folgen, können – wie im folgenden näher erläutert – nicht-perturbativ aus Computer-Simulationen von Gitterfeldtheorien gewonnen werden [14, 17, 18, 85, 124]. Da hierbei obere Schranken von unter 1 TeV vorausgesagt werden, sollte das Higgs-Teilchen mit der nächsten Generation von Beschleunigern gefunden werden können [20].

Der skalare Sektor des Standard-Modells, die 4dimensionale $O(4)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie, ist trivial [24]. Unter Trivialität versteht man in diesem Zusammenhang, daß die Theorie wechselwirkungsfrei wird, sobald der Impuls-Abschneideparameter unendlich groß wird. Aus diesem Grund erhält man nur bei einem endlichen Abschneideimpuls eine wechselwirkende Theorie, d.h. das Modell kann nur als eine effektive Feldtheorie betrachtet werden. Aus der Trivialitätseigenschaft läßt sich eine obere Schranke für die renormierte quartische Kopplung ableiten. Unter der Annahme, daß die Eichwechselwirkungen störungstheoretisch behandelt werden können, kann dies als eine obere Schranke für die Masse des Higgs-Teilchens interpretiert werden [4]. Die obere Schranke ist deswegen von besonderem Interesse, da sie die Energie-Skala beschreibt, bei der sich „Neue Physik jenseits des Standard-Modells“ zeigen muß. D.h., das Standard-Modell ist nur eine effektive Theorie, die bei Energien oberhalb einer gewissen Schwelle ihre Gültigkeit verliert und dann durch eine neue, umfassendere Theorie ersetzt werden muß, die im Niederenergie-Limes in das Standard-Modell übergeht. Die Berechnung der oberen Schranke erfordert allerdings nicht-perturbative Methoden, wie zum Beispiel Monte-Carlo-Simulationen. Mehrere analytische und numerische Rechnungen führen zu einer oberen Schranke für die Higgs-Boson-Masse von ca. 650 – 750 GeV [14, 17, 18, 32, 85, 81, 124].

1.1 Problemfeld im ersten Teil

Da der Wert der oberen Schranke für die Masse des Higgs-Bosons, das im Rahmen der reinen Φ^4 -Theorie auch σ -Teilchen genannt wird, jedoch auch von der Art der verwendeten Gitterregularisierung abhängen kann [83, 85, 88, 89, 91], ist ein Vergleich

von unterschiedlichen Regularisierungs-Schemata von Interesse. In dieser Arbeit wird die $O(4)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie in der gebrochenen Phase (dies ist die für das Standard-Modell relevante) mittels Monte-Carlo-Simulationen auf 4dimensionalen hyperkubischen Gittern untersucht. Dabei werden zwei unterschiedliche Diskretisierungen der Kontinuum-Wirkung benutzt: die Standard-Gitter-Wirkung mit einer Kopplung der Feldvariablen ausschließlich über benachbarte Gitterplätze und eine im Sinne Symanziks [39] verbesserte Wirkung, die zusätzlich Kopplungen über zwei Gitterabstände in einer Richtung enthält.

Numerische Simulationen können nur auf endlichen Gittern durchgeführt werden. Darum müssen die Ergebnisse zu unendlichem Volumen extrapoliert werden. Dies ist allerdings nur dann verlässlich möglich, wenn die Auswirkungen des endlichen Volumens auf die Meßgrößen ausreichend verstanden sind. In der gebrochenen Phase der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie haben die Volumenabhängigkeiten zwei Ursachen: Erstens müssen die langreichweitigen Korrelationen der (im endlichen Volumen fast) masselosen Goldstone-Bosonen, die im Zusammenhang mit der spontanen Symmetriebrechung der $O(4)$ -Symmetrie auftreten, berücksichtigt werden. Zweitens sind auch die Volumeneffekte im Zusammenhang mit der Masse des σ -Teilchens nicht zu vernachlässigen, sofern die zugehörige σ -Korrelationslänge nicht wesentlich kleiner als die Gitterausdehnung ist.

Für ausreichend große Gitter werden allerdings die Effekte des endlichen Gittervolumens, die durch die Goldstone-Bosonen verursacht werden, dominieren. In diesem Fall wird die chirale Störungstheorie benutzt, um die Größen im unendlichen Volumen aus den Daten auf endlichen Gittern zu gewinnen [17, 67, 69–71, 73, 75–78, 80]. Um die Eigenschaften der Theorie bei kleiner werdendem Gitterabstand zu studieren, muß man sich dem kritischen Punkt so nahe wie möglich nähern. Dies hat allerdings so kleine σ -Massen im Vergleich zu den technisch realisierbaren Gittergrößen zur Folge, daß die Volumeneffekte, die durch das σ -Teilchen verursacht werden, nicht mehr vernachlässigt werden können. Dann ist die chirale Störungstheorie nicht länger der geeignete Zugang zur Erklärung der Volumenabhängigkeiten. Auf der anderen Seite wird vermutet, daß die Φ^4 -Theorie – zumindest im Skalenbereich – schwach wechselwirkend ist und dementsprechend dort die renormierte Störungstheorie in der quartischen Kopplung angewendet werden kann. Dies ist sowohl in endlichem als auch in unendlichem Volumen möglich, und erlaubt so eine Beschreibung der Volumeneffekte der gemessenen Größen im Rahmen von renormierter Störungstheorie [81, 124]. Die gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen Daten und der störungstheoretischen Beschreibung der Volumenabhängigkeiten bestätigt im Nachhinein die Richtigkeit der Vermutung. Der Einfluß der endlichen Gitterkonstante auf diese Volumenkorrekturen kann in dem hier untersuchten Parameter-Bereich vernachlässigt werden.

Auf diese Weise werden der Felderwartungswert Σ , die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z der Goldstone-Bosonen und die Masse m_σ des σ -Teilchens bestimmt. Die Bestimmung der im unendlichen Volumen definierten Größen Σ , Z und m_σ ermöglicht das Studium des Skalenverhaltens der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie und insbesondere auch die Berechnung der oberen Schranke für die Masse des Higgs-Bosons. In der vorliegenden Arbeit sind auch die logarithmischen Korrekturen zu den Molekularfeld-Approximationen der Skalengesetze numerisch bestimmt worden.

Im ersten Teil der Arbeit tritt die σ -Masse als Parameter in den Volumenkorrekturen bei der Schleifenentwicklung der renormierten Störungstheorie auf. Die Instabilität des σ -Teilchens, das in eine gerade Anzahl von Goldstone-Bosonen zerfallen kann, ist dabei implizit berücksichtigt. Im zweiten Teil der Arbeit wird ein Verfahren benutzt, die σ -Resonanz ohne den Rückgriff auf störungstheoretische Formeln zu untersuchen.

1.2 Problemfeld im zweiten Teil

Neben der Analyse von Massen stabiler Teilchen und anderen Niederenergieparametern sind in jüngster Zeit auch die Berechnung von elastischen Streuphasen und die Bestimmung von Resonanzparametern in feldtheoretischen Modellen auf Gittern möglich geworden. Im zweiten Teil der vorliegenden Arbeit werden die Streuphasen der Goldstone-Boson-Streuung numerisch bestimmt und mit Resultaten aus störungstheoretischen Rechnungen verglichen. Ausgangspunkt sind theoretische Überlegungen von M. Lüscher [102–104], welche elastische Streuphasen im *unendlichen* Volumen mit dem Energiespektrum von Zwei-Teilchen-Zuständen im *endlichen* Volumen in Beziehung setzen.

Hier wird die Anwendbarkeit dieser Methode am Beispiel der 4komponentigen Φ^4 -Theorie in der gebrochenen Phase mittels Monte-Carlo-Simulationen auf endlichen Gittern demonstriert. Dieses Verfahren kann allerdings nur angewendet werden, wenn das Modell keine masselosen Teilchen enthält. Daher ist es erforderlich, die $O(4)$ -Symmetrie durch Einführung einer äußeren Quelle j explizit zu brechen und so den Goldstone-Bosonen eine nichtverschwindende, ausreichend große Masse zu geben. Lüscher's Methode zur Bestimmung der Streuphasen ermöglicht erstmals in 4dimensionalen Modellen auch die nicht perturbative MC-Untersuchung instabiler Teilchen, d.h. in unserem Fall des σ -Teilchens. Der Verlauf der numerisch ermittelten Streuphase zeigt nicht nur qualitativ das erwartete Resonanzverhalten, vielmehr erlaubt die Genauigkeit der Daten auch die Bestimmung der Resonanzmasse m_σ und der Zerfallsbreite Γ_σ . Die erhaltenen Ergebnisse sind konsistent mit störungstheoretischen Rechnungen. Das hier diskutierte Modell ist als Test für das Studium von instabilen Teilchen auf endlichen Gittern von allgemeinem Belang, und die dabei gewonnenen Erfahrungen sollten auch in anderen Modellen (z.B. in der QCD) hilfreich sein.

1.3 Gliederung der Arbeit

Kapitel 2 gibt eine Einführung in die $O(4)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie und ihren Zusammenhang mit dem Standard-Modell. Es wird kurz auf den Mechanismus der spontanen Symmetriebrechung eingegangen und der Begriff der Trivialität erläutert. Abschließend wird hier gezeigt, wie aus dieser Tatsache eine obere Schranke für die Higgs-Masse abgeleitet werden kann. Im dritten Kapitel wird die Gitterformulierung der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie eingeführt und das Konzept der „verbesserten“ Wirkungen erörtert. An dieser Stelle wird auch auf andere Arbeiten in dem

hier behandelten Kontext eingegangen. Insbesondere wird ein kurzer Überblick zur analytischen „Lösung“ von Lüscher und Weisz [32] gegeben, die mit den Methoden der Hochtemperatur-Entwicklung, renormierter Störungstheorie und Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen die Trivialität der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie nochmals deutlich gezeigt haben.

Das Rüstzeug für Monte-Carlo-Simulationen auf endlichen Gittern, u.a. der Cluster-Algorithmus und die sogenannte Histogramm-Methode, werden im vierten Kapitel bereitgestellt. Hier werden auch die Details zu den numerischen Simulationen und den gemessenen Operatoren diskutiert. Das fünfte Kapitel gibt einen Überblick über die beiden Methoden zur Berücksichtigung der Effekte des endlichen Gittervolumens: chirale Störungstheorie und renormierte Störungstheorie. Die Divergenzen aufgrund der masselosen Goldstone-Bosonen werden hierbei gesondert behandelt. Die Formeln, die die Verknüpfung zwischen den auf endlichen Gittern gemessenen Operatoren und den im unendlichen Volumen definierten Größen Σ , Z , und m_σ herstellen, werden hergeleitet. Im folgenden sechsten Kapitel wird das Skalenverhalten dieser Größen analysiert, wobei die kritischen Exponenten der logarithmischen Korrekturen zu den Skalengesetzen aus der Molekularfeld-Approximation bestimmt werden. Außerdem wird die Konsistenz der Resultate mittels der Integration der entsprechenden Renormierungsgruppen-Gleichungen getestet. Zum Schluß des ersten Teils dieser Arbeit wird im siebten Kapitel die Regularisierungsabhängigkeit der oberen Schranke für die Higgs-Masse diskutiert. Es werden Kriterien angegeben, mittels derer sich die unterschiedlichen Gitterregularisierungen miteinander vergleichen lassen.

Der zweite Teil dieser Arbeit, beginnend mit Kapitel 8, setzt sich mit den Resonanz-Eigenschaften des σ -Teilchens auseinander. Zunächst wird das von Lüscher [103] vorgeschlagene Verfahren zur Berechnung der Streuphasen aus dem Spektrum von Zwei-Teilchen-Zuständen im endlichen Volumen vorgestellt. Da das Verfahren nur angewendet werden kann, wenn das Modell keine masselosen Teilchen enthält, wird die $O(4)$ -Symmetrie der Φ^4 -Theorie durch Ankopplung an eine äußere Quelle j explizit gebrochen. Im neunten Kapitel werden die für das Spektrum der 2-Teilchen-Zustände relevanten 2-Teilchen-Operatoren und deren Korrelationsfunktionsmatrix berechnet. Als Wellenfunktionen in den 2-Teilchen-Operatoren wird ein Ansatz mit ebenen Wellen mit den von Lüscher vorgeschlagenen Eigenfunktionen des Helmholtz-Operators verglichen. Die Stabilität der numerischen Resultate gegenüber dieser und anderer Variationen bei der Bestimmung des 2-Teilchen-Energiespektrums wird demonstriert. Im zehnten und letzten Kapitel werden aus den numerischen Resultaten für die Streuphasen des Isospin-0-Kanals die Masse m_σ und die Zerfallsbreite Γ_σ abgelesen.

Die Ergebnisse dieser Arbeit werden jeweils am Ende der beiden Teile in den Abschnitten 7.3 und 10.2 zusammengefaßt (s. S. 110 bzw. S. 169). Technische Details, wie beispielsweise die Sattelpunktentwicklung, die numerische Berechnung der Volumenkorrekturen, die numerische Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen etc. werden in Anhängen abgehandelt. Einige Teil-Resultate dieser Arbeit sind in Veröffentlichungen und Konferenzbeiträgen erschienen [123–125].

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

...the ... of ...
...the ... of ...
...the ... of ...

Teil I

Volumeneffekte,
Skalenverhalten
und
Regularisierungsabhängigkeit

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

1947

Kapitel 2

Vom Standard-Modell zur $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie

2.1 Standard-Modell

Das sogenannte Standard-Modell der Elementarteilchenphysik beinhaltet die Glashow-Salam-Weinberg-Theorie (GSW), eine vereinheitlichte Theorie der elektromagnetischen und der schwachen Wechselwirkung [9], und die Quantenchromodynamik (QCD), die Theorie der starken Wechselwirkung [7]. Den mathematischen Rahmen des Standard-Modelles bildet eine $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ Eichtheorie. Mit der Glashow-Salam-Weinberg-Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung gelang es, die bis dahin als unabhängig betrachteten Theorien der Quantenelektrodynamik und der V-A-Fermi-Theorie der schwachen Wechselwirkung miteinander zu vereinigen. Die GSW-Theorie ist – im Gegensatz zum letztgenannten Modell – eine in allen Ordnungen der Störungstheorie renormierbare Theorie. Ein großer Erfolg dieses Modelles bestand in der Vorhersage der Massen der intermediären Vektorbosonen $W^\pm$ und Z^0 , deren Existenz 1982 am Europäischen Kernforschungszentrum CERN experimentell nachgewiesen werden konnte¹ [22].

Die Massen der Eichbosonen sind durch den Vakuumerwartungswert des Higgs-Feldes und den Weinberg-Mischungswinkel bestimmt. Die Massen des Higgs-Bosons und der Fermionen sind freie Parameter der Theorie, deren Werte experimentell bestimmt werden müssen. Der experimentelle Nachweis des zur Massenerzeugung benötigten Higgs-Bosons fehlt bisher noch. Die Klärung des Higgs-Boson-Problems ist die Herausforderung an die nächste Generation von Beschleunigern, die Energien von über 1 TeV erreichen werden [20]. Ein – vielleicht auch nur psychologisch bedingt – unbefriedigender Aspekt des Standard-Modelles ist die Vielzahl seiner freien Parameter. Versuche, diese Anzahl beispielsweise durch die Einbettung in eine vereinheitlichte Eichsymmetriegruppe zu verringern, werden eifrig diskutiert. Noch gibt es jedoch keine experimentellen Anzeichen für *neue Physik jenseits des Standard-Modelles* [3, 5], obwohl es einige Fragen offen läßt, wie z.B. die Frage nach der Anzahl der Fermion-Generationen.

¹Mittlerweile sind schon einige Millionen dieser Eichbosonen produziert worden.

	1. Generation		2. Generation		3. Generation	
LEPTONEN	$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix}_L$	e_R	$\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix}_L$	μ_R	$\begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \end{pmatrix}_L$	τ_R
QUARKS	$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}_L$	u_R, d_R	$\begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}_L$	c_R, s_R	$\begin{pmatrix} t(?) \\ b \end{pmatrix}_L$	$t_R(?), b_R$

Diagramm A: Die bekannten fermionischen Materieteilchen unterteilt in Quarks und Leptonen sowie in drei Generationen [19]. L indiziert die linkshändigen Dubletts bezüglich der $SU(2)$ -Eichgruppe (leptonischer Isospin $T_3 = \pm 1/2$, Hyperladung $Y = -1$) und R die rechtshändigen Singulets (leptonischer Isospin $T = 0$, Hyperladung $Y = -2$). Die elektrische Ladung berechnet sich nach der Regel von Gell-Mann und Nishijima zu $Q = T_3 + Y/2$. Die Quarks tragen zusätzlich noch den Farbfreiheitsgrad.

In Diagramm A sind die derzeit bekannten drei Generationen fundamentaler Fermionen aufgelistet. Obwohl das *top*-Quark, ein vermutlich sehr schweres Fermion aus der dritten Generation [8], noch nicht experimentell nachgewiesen werden konnte [5], gilt seine Existenz als gesichert [21]. Inwiefern noch weitere Generationen fundamentaler Fermionen existieren, ist noch nicht geklärt, doch konnte aus der präzisen Vermessung der Breite der Z^0 -Resonanz in jüngster Zeit eine weitere Generation mit einem leichten Neutrino ausgeschlossen werden [3].

Nur die Quarks unterliegen der starken Wechselwirkung, die im Standard-Modell durch die Quantenchromodynamik, eine lokale $SU(3)$ -Eichtheorie, beschrieben wird. Sie besitzen eine entsprechende Farbladung. Die Quarks befinden sich in Triplets der Farb- $SU(3)$ -Symmetrie und können nicht frei auftreten. Dies wird mit Quarkschluß oder *confinement*² bezeichnet. Dabei fordert man für alle in der Natur beobachteten hadronischen Zustände, daß sie farb-neutral („weiß“) sind, d.h. Singulets bezüglich der Farbe darstellen.

Alle im Diagramm A aufgelisteten Fermionen sind an der elektroschwachen Wechselwirkung beteiligt, die durch die $SU(2) \times U(1)$ -Lie-Gruppe beschrieben wird. Die zugehörigen Felder transformieren sich nach Darstellungen der $SU(2)$ - bzw. $U(1)$ -Eichgruppe jeweils zu festem Wert des schwachen Isospins T und der Hyperladung Y . Im Gegensatz zur starken Wechselwirkung unterscheidet die elektroschwache jedoch zwischen links- und rechtshändigen Teilchen: Das Standard-Modell ist eine *chirale* Theorie, d.h. die links- und rechtshändigen Fermionen transformieren sich unabhängig voneinander. Die linkshändigen Fermionen in den einzelnen Generationen treten als $SU(2)$ -Dubletts auf, während die rechtshändigen Fermionen $SU(2)$ -Singulett-Zustände sind und nicht an das $SU(2)$ -Eichfeld koppeln. Für die Erzeugung der Massen der $W^\pm$ und Z^0 -Vektorbosonen und der massiven Fermionen ist der Higgs-Mechanismus verantwortlich [6].

2.2 Spontane Symmetriebrechung und Higgs-Mechanismus

Wird die Invarianz der Lagrangedichte für die elektroschwache Wechselwirkung unter lokalen $SU(2) \times U(1)$ -Eichtransformationen gefordert, so muß ein vierkomponentiges Eichfeld $(A_\mu^0, \dots, A_\mu^3)$ eingeführt werden [1]. Die folgenden Aussagen beziehen sich auf die Minkowski-Metrik. Mit der Abkürzung

$$A_\mu^{(Y,T)} = -\frac{i}{2} \left[Y g' A_\mu^0 + T g \sum_{a=1}^3 A_\mu^a \sigma_a \right] \quad (2.1)$$

werden kovariante Ableitungen $D_\mu^{(Y,T)} = \partial_\mu - A_\mu^{(Y,T)}$ definiert, deren konkrete Gestalt von den jeweiligen Quantenzahlen T und Y des Feldes abhängt, das über diese Ableitung an das Eichfeld koppeln soll. Die zwei Kopplungskonstanten g und g' geben die Kopplungsstärken der $SU(2)$ - bzw. $U(1)$ -Eichgruppe an, und σ_a sind die drei Paulimatrizen. Der Feldstärketensor ist dann durch $F_{\mu\nu} = A_{\mu|\nu}^{(1,1)} - A_{\nu|\mu}^{(1,1)} + [A_\mu^{(1,1)}, A_\nu^{(1,1)}]$ gegeben.

Würde kein zusätzliches Feld in die Lagrangedichte des Eichfeld-Fermion-Systems

$$\mathcal{L}_1 = -\frac{1}{4} \sum_{a=0}^3 F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \text{Re} \left[\bar{\psi}_R i \not{D}^{(-2,0)} \psi_R + \bar{\Psi}_L i \not{D}^{(-1,1/2)} \Psi_L \right] \quad (2.2)$$

eingeführt³, so besäßen beispielsweise das Elektron und das Neutrino die gleichen Massen (nämlich Null), da sie sich im gleichen L -Multipllett (s. Diagramm A) befinden. Die Eichfelder koppeln nur *minimal*, d.h. nur über die kovariante Ableitung an die Fermionen an.

Durch die Einführung eines $SU(2)$ -Dubletts von skalaren Feldern und durch den Effekt der spontanen Symmetriebrechung werden im Higgs-Mechanismus zwei Effekte gleichzeitig erreicht: Erstens erhalten Elektron, Müon, τ -Lepton und die Quarks eine Masse und zweitens werden drei Komponenten des Eichfeldes massiv, während eine Komponente, nämlich das Photonfeld, masselos bleibt.

Die Lagrangedichte für das skalare komplexe $SU(2)$ -Dublett (mit der Hyperladung $Y=1$), das an ein $SU(2) \times U(1)$ -Eichfeld koppelt, lautet ($v = \text{const.}$):

$$\mathcal{L}_2 = \left(D_\mu^{(1,1/2)} \Phi \right)^* D_\mu^{(1,1/2)} \Phi - \frac{g_0}{4!} \left(2\Phi^* \Phi - v^2 \right)^2 \quad (2.3)$$

und die Wechselwirkung zwischen dem Skalarfeld Φ und den Fermionen wird durch einen Yukawa-Wechselwirkungs-Term der Art

$$\mathcal{L}_3 = -y \left(\bar{\Psi}_L \psi_R \Phi + \Phi^* \bar{\psi}_R \Psi_L \right) \quad (2.4)$$

beschrieben, wobei die Yukawa-Kopplung y eine für jedes Fermion typische Konstante ist.

²Da zahlreiche Originalliteratur in englisch verfaßt ist, wird in dieser Arbeit neben der deutschen Bezeichnung häufig auch *kursiv* die angelsächsische Form angeben.

³Zur Vereinfachung wird nur die leichteste Leptonfamilie betrachtet.

Betrachten wir zunächst die (klassische) Lagrangedichte für das skalare komplexe $SU(2)$ -Dublett

$$\Phi = \begin{pmatrix} (\phi_1 + i\phi_2)/\sqrt{2} \\ (\phi_3 + i\phi_4)/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

isoliert, so ist sie äquivalent zu der eines reellen $O(4)$ -symmetrischen Skalarfeldes:

$$\mathcal{L}_{Higgs} = \frac{1}{2} \partial_\mu \vec{\phi} \partial_\mu \vec{\phi} - \frac{m^2}{2} \vec{\phi}^2 + \frac{g_0}{4!} (\vec{\phi}^2)^2 \quad (2.6)$$

Aus dem Goldstone-Theorem [10, 121] weiß man: Ist die globale $O(N)$ -Symmetrie spontan zur $O(N-1)$ gebrochen, so erhält genau ein Freiheitsgrad, das Higgs-Teilchen, eine endliche Masse, während alle anderen $N-1$ Felder, die Goldstone-Bosonen, masselos sind. Das Auftreten von masselosen Goldstone-Bosonen ist ein Phänomen, das unter bestimmten Voraussetzungen stets mit der spontanen Brechung einer globalen kontinuierlichen Symmetrie verknüpft ist. Zu den Annahmen des Theorems zählt beispielsweise die relativistische Kovarianz des erzeugenden Stromes der Symmetrietransformationen. Die spontane Symmetriebrechung im Standard-Modell oder ganz allgemein in einer Eichfeldtheorie ist nicht mit dem Auftreten masseloser Moden, sondern mit der Verletzung dieser Annahme verbunden.

Betrachten wir nun die Lagrangedichte für das skalare komplexe $SU(2)$ -Dublett, das an ein $SU(2) \times U(1)$ -Eichfeld koppelt, so können die drei den Goldstone-Bosonen entsprechenden Freiheitsgrade durch eine geeignete lokale $SU(2)$ -Eichtransformation völlig aus der Lagrangedichte eliminiert werden. Das skalare Feld erhält dann die spezielle Gestalt

$$\Phi = \begin{pmatrix} 0 \\ (\varphi - v)/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Diese Eichung wird unitär genannt. Das rechtshändige Singulett und die mit der $U(1)$ -Symmetrie verbundene Komponente des Eichfeldes A_μ^0 bleiben von der Eichtransformation unberührt.

In der unitären Eichung werden in der Lagrangedichte der Glashow-Salam-Weinberg-Theorie $\mathcal{L}_{GSW} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_3$ nach Einführung einer geeigneten Linearkombination der Eichfelder

$$\begin{pmatrix} A_\mu \\ Z_\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_W & \sin \theta_W \\ -\sin \theta_W & \cos \theta_W \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_\mu^0 \\ A_\mu^3 \end{pmatrix}, \quad W_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_\mu^1 - iA_\mu^2) \quad (2.8)$$

Massenterme insbesondere der Eichfelder Z_μ und W_μ generiert. θ_W ist der sogenannte Weinberg-Winkel, wobei $\tan \theta_W = g'/g$. Bis zu diesem Punkt muß die Diskussion *quasi klassisch* geführt werden. Die Quantisierung der Felder beginnt erst mit dem Ausdruck nach der Eichung.

Die Felder W_μ , $\bar{W}_\mu$, Z_μ beschreiben die massiven intermediären Vektorbosonen $W^\pm$ und Z^0 , Spin-1-Teilchen mit drei Polarisationszuständen⁴. Die Gesamtzahl der Freiheitsgrade ist also vor und nach der spontanen Symmetriebrechung konstant. Das

⁴Massive Spin-1-Teilchen besitzen im Gegensatz zu den masselosen – wie beispielsweise dem Photon – auch einen longitudinalen Freiheitsgrad.

Standard-Modell ist auch nach der spontanen Brechung der Eichsymmetrie weiterhin renormierbar [13].

In Baumgraphen-Ordnung ergeben sich folgende Massen im Teilchenspektrum⁵:

$$\begin{aligned}
 W^\pm\text{-Boson} \quad m_W &= v g/2 \\
 Z^0\text{-Boson} \quad m_Z &= m_W \sqrt{1 + (g'/g)^2} \\
 \text{Photon} \quad m_\gamma &= 0 \\
 \text{Higgs-Boson} \quad m_H &= v \sqrt{g_0/3} \\
 \text{massive Fermionen} \quad m_f &= v y_f.
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Da die elektroschwache Skala $v \approx 246 \text{ GeV}$, der Weinberg-Winkel θ_W und die elektrische Ladung $e_0 = g \sin \theta_W$ aus niederenergetischen Experimenten bekannt sind, können die Werte von m_W und m_Z berechnet werden (und umgekehrt). Die Massen der Fermionen und des Higgs-Bosons bzw. die Werte der renormierten quartischen Kopplung und der Yukawa-Kopplungen können hingegen nicht vorhergesagt werden. Es zeigt sich, daß beide Eichkopplungen g, g' ziemlich klein sind. Dieser Sachverhalt gestattet es, den skalaren Sektor des Standard-Modells praktisch unabhängig von den restlichen Termen in der Wirkung zu betrachten und die Eichkopplung störungstheoretisch zu berücksichtigen. Der Wert der quartischen Kopplung g_0 des Skalarfeldes ist *a priori* nicht eingeschränkt, solange die Masse des Higgs-Bosons nicht bestimmt ist.

Die 4dimensionale Φ^4 -Theorie, der skalare Sektor des Standard-Modelles, ist trivial (s. Abschn. 2.3). D.h., die renormierte quartische Selbstkopplung g_R verschwindet bei unendlichem Abschneideimpuls. Umgekehrt bedeutet dieses Ergebnis der numerischen und analytischen Untersuchungen, daß g_R bei vorgegebenem endlichen Abschneideparameter Λ – selbst für eine unendlich große nackte Kopplung g_0 – nicht beliebig groß werden kann. Mit Hilfe von Gl. (2.9) kann aus dem maximalen Wert der renormierten Kopplung bei vorgegebenem Λ eine obere Schranke für die Higgs-Masse abgelesen werden.

Daher sind nichtstörungstheoretische Betrachtungen des skalaren Sektors, wie in dieser Arbeit geschehen, mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen der gitterregulisierten $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie in der gebrochenen Phase von Interesse. Da auch die Yukawa-Kopplungen y unabhängige Parameter des Standard-Modelles sind, deren Größe *a priori* – insbesondere der Wert für das *top*-Quark – nicht festliegt, sind die nicht-perturbativen Monte-Carlo-Untersuchungen (u.a. von der Gruppe um Prof. Jersák) auf den Fermion-Higgs-Sektor ausgedehnt und sogenannte Yukawa-Modelle studiert worden [25, 27, 37]. Dabei ließ sich die perturbativ vermutete Trivialität der Yukawa-Wechselwirkung bestätigen. Eine ausführlichere Diskussion der Yukawa-Modelle würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Deshalb sei der interessierte Leser auf die Dissertation von C. Frick und die dort angegebene Literatur verwiesen [26].

⁵ Ausgedrückt in renormierten Größen an einem niederenergetischen Renormierungspunkt.

2.3 Trivialität der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie

Die Trivialität einer Quantenfeldtheorie bedeutet, daß – gleich wie die nackten Parameter der Theorie gewählt werden – die renormierte Feldtheorie eine wechselwirkungsfreie Theorie wird, wenn der Regularisierungsparameter entfernt wird. Das bedeutet, daß die renormierte Kopplung im Grenzfall eines unendlich großen Impuls-Abschneideparameters Λ verschwindet. Obwohl letztendlich nicht mathematisch exakt bewiesen, gilt als ziemlich gesichert, daß 4dimensionale Φ^4 -Theorie trivial ist [24, 32]. Dies gilt sowohl für die 1komponentige als auch für die $O(4)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie.

Um die Trivialität der 4dimensionalen $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie zu veranschaulichen, sei hier die 1-Schleifen- β -Funktion betrachtet:

$$\beta \equiv \mu \frac{\partial g_R}{\partial \mu} = \beta_1 g_R^2, \quad (\beta_1 > 0). \quad (2.10)$$

Die Lösung $\ln(\mu/\Lambda) \sim -1/(\beta_1 g_R)$ der Differentialgleichung (2.10) impliziert, daß die renormierte Kopplung, definiert bei einer physikalischen Energie μ (wie etwa bei der Higgs-Masse m_H), verschwindet, wenn der Abschneideparameter Λ nach Unendlich geschickt wird. Ein Ergebnis der numerischen und analytischen Untersuchungen ist, daß dies für alle Werte der nackten Kopplung $g_0 > 0$ gilt⁶ und der maximale Wert der renormierten Kopplung für eine nackte Kopplung $g_0 = \infty$ angenommen wird. In der Sprechweise der gitterregularisierten Φ^4 -Theorie (s. Kapitel 3) liegt die gesamte Phasenübergangslinie $\kappa_c(\lambda)$ in Abb. 3.1 zwischen gebrochener und symmetrischer Phase im Einzugsbereich des Gaußschen Fixpunktes $(\kappa, \lambda) = (1/8, 0)$.

Um dennoch eine wechselwirkende Theorie zu erhalten, muß der Impuls-Abschneideparameter Λ auf einen endlichen Wert gesetzt werden – quasi als ein neuer Parameter der Theorie. Da skalenverletzende Terme für Energien E weit unterhalb des Abschneideimpulses $E \ll \Lambda$ (s. Abschn. 3.3) vernachlässigbar sind, besitzen wir aber eine *effektive*, unterhalb dieser Energieskala gültige Theorie. Bei Energien oberhalb dieses Wertes verliert die Theorie ihre Gültigkeit. Diese Beschränkung des Abschneideimpulses nach unten (im Verhältnis zu den physikalischen Energien wie der Higgs-Masse) ist aber nach den obigen Überlegungen gleichbedeutend mit einer oberen Schranke für die renormierte Kopplung. Da die renormierte Kopplung über die Baumgraphen-Beziehung (2.9) mit der Higgs-Masse verknüpft ist, ergibt sich gleichermaßen eine obere Schranke für die Higgs-Masse, die sogenannte **Trivialitätsschranke** [4]. Die obere Schranke liegt unterhalb der Baumgraphen-Unitaritätsschranke, so daß der skalare Sektor des Standard-Modells keine starke Wechselwirkung haben kann [14, 17, 18, 32, 85, 81, 124].

Ein nichtverschwindender Abschneideparameter Λ kann auf unterschiedliche Weisen eingeführt werden und führt trotzdem im Grenzfall $\Lambda \rightarrow \infty$ zu $g_R \rightarrow 0$. Eine der Fragestellungen dieser Arbeit war es, in diesem Zusammenhang die Regularisierungsabhängigkeit der oberen Schranke für die Higgs-Masse zu untersuchen. Bei dem

⁶Negative nackte Kopplungen g_0 sind deswegen nicht erlaubt, weil die Theorie dann ein Energiespektrum besäße, das nicht nach unten beschränkt wäre.

Vergleich zweier Gitterwirkungen (neben der Standard-Wirkung auf einem hyperkubischen Gitter eine im Sinne Symanziks *verbesserte* Wirkung) ist nur eine geringe Abhängigkeit der Trivialitätsschranke von der Art der Gitterregularisierung gefunden worden (s. Kap. 7) [124].

Kapitel 3

Die Φ^4 -Theorie auf dem Gitter

Ausgehend von der Pfadintegral-Darstellung wird die Φ^4 -Theorie auf einem diskreten Raum-Zeit-Gitter regularisiert [40]. Der Kehrwert des Gitterabstandes a , der Impuls-Abschneideparameter $\Lambda = 1/a$ regularisiert die auftretenden Energie- und Impulswerte im ultravioletten Bereich. Im infraroten Bereich sorgt die endliche Ausdehnung L des Gitters für ein diskretes Impulsspektrum und damit für eine Begrenzung der möglichen nichtverschwindenden Impulswerte. Alle dimensionsbehafteten, physikalischen Observablen lassen sich in Einheiten der dimensionsbehafteten Gitterkonstanten a ausdrücken und sind im allgemeinen von der konkreten Wahl der Gitterregularisierung, wie z.B. von der Form der Wirkung oder von der Gittergeometrie, abhängig.

Durch die Diskretisierung werden die kontinuierlichen äußeren Symmetrien der Wirkung gebrochen, so daß die Φ^4 -Theorie in der Gitterformulierung nur noch eine diskrete Untergruppe der Kontinuumsymmetrie besitzt. Wie in jedem anderen Regularisierungsschema, so werden auch in der Gitterregularisierung die physikalischen Observablen der Theorie im Limes des verschwindenden Regularisierungsparameters a festgelegt. Bei der Gitterregularisierung ist es der Kontinuums-limes ($a \rightarrow 0$), in dem die physikalischen Größen von der Art der Regularisierung unabhängig und die gebrochenen äußeren Symmetrien wiederhergestellt werden. Für die Ausführung des Grenzprozesses ist allerdings erforderlich, daß die Theorie renormierbar ist und einen Phasenübergang zweiter Ordnung besitzt, dessen Universalitätseigenschaften man ausnützt. Am kritischen Punkt divergieren die zu den Massen gehörenden Korrelationslängen, die die physikalische Längenskala in Gittereinheiten darstellen, so daß die unterliegende Gitterstruktur mehr und mehr in den Hintergrund tritt. In der Nähe dieser Phasenübergänge treten gitterunabhängige Eigenschaften in Erscheinung, die durch Skalengesetze beschrieben werden. Die Skaleneigenschaften lassen sich – im Rahmen der renormierten Störungstheorie – durch Symanzik's Programm der Einführung zusätzlicher Terme zur Wirkung noch *verbessern*. In den hier präsentierten numerischen Simulationen wird deshalb zum Vergleich auch eine auf dem Baumgraphen-Niveau *verbesserte* Wirkung studiert.

Abschließend wird in diesem Kapitel kurz die Grundidee bei der analytischen „Lösung“ der Φ^4 -Theorie auf dem Gitter von Lüscher und Weisz [30–32] vorgestellt.

3.1 Pfadintegralquantisierung

Um das bei der Pfadintegral-Methode [28, 35] verwendete Maß auf dem Raum der Felder mathematisch sauber zu definieren, erweist es sich als notwendig, zu euklidischer Zeit x_4 überzugehen. Die physikalische Theorie erhält man aus der euklidischen Version nach analytischer Fortsetzung zu komplexer Zeit $z = x_4 + ix_0$, indem man $x_4 = 0$ setzt. Gegenüber dem kanonischen Formalismus zur Quantisierung wird bei der Pfadintegral-Methode das euklidische Skalarfeld nicht als Feldoperator betrachtet: Es kann als Zufallsvariable, d.h. als ein verallgemeinerter *stochastischer* Prozeß, aufgefaßt werden. Durch Diskretisierung des Pfadintegrals gelangt man zur *statistischen* Auffassung des euklidischen Skalarfeldes, bei der es als verallgemeinerte Spinvariable angesehen wird.

Die Erwartungswerte von Observablen werden als Funktionalintegral über alle möglichen Feldkonfigurationen dargestellt. Das entsprechende Funktionalmaß auf dem Raum der Felder wird üblicherweise in der Form

$$d\mu(\phi) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{\hbar} S(\phi)} \mathcal{D}\phi$$

mit $Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar} S(\phi)}$ (3.1)

geschrieben¹. Dabei ist $\mathcal{D}\phi$ ein „Lebesgue-Maß“, $S(\phi)$ die klassische Wirkung und das Zustandsintegral Z eine Normierungskonstante. Sowohl $\mathcal{D}\phi$ als auch Z benötigen eine mathematisch befriedigende Definition [35].

Eine Möglichkeit, zu wohldefinierten Ausdrücken von Erwartungswerten und n -Punkt-Funktionen zu gelangen, besteht darin, daß man die euklidische Raum-Zeit durch ein Gitter $\mathbb{Z}_L^4$ der Periode L ersetzt². Hierbei wird zumeist die Gitterkonstante, der Abstand zweier benachbarter Punkte im Gitter, zu 1 gesetzt. Das Lebesgue-Maß $\mathcal{D}\phi = \prod_x d\Phi(x)$ ist nun wohldefiniert, weil der Pfadraum endlichdimensional ist, und das Funktionalintegral (3.1) ist konvergent, sofern das Potential in der euklidischen Wirkung nach unten beschränkt ist (Stabilitätsbedingung). Das Zustandsintegral geht – im Sinne der statistischen Mechanik interpretiert – in eine Summe über den Konfigurationsraum über, in der die einzelnen Konfigurationen mit dem Boltzmannfaktor gewichtet sind:

$$Z = \int \prod_x d\Phi(x) e^{-S(\Phi)} = \sum_{\{\Phi\}} e^{-S(\Phi)} \quad (3.2)$$

Erwartungswerte bezüglich des (unnormierten) Gewichts e^{-S} werden mit $\langle \dots \rangle$ bezeichnet. Definiert man eine dimensionsbehaftete Gitterkonstante a , so können alle Größen in dieser physikalischen Längenskala ausgedrückt werden.

Aus der Feldtheorie auf dem periodischen Gitter ($x \in (a\mathbb{Z}_L)^4$) mit Gitterkonstante a wird die Theorie im Kontinuum in zwei Schritten gewonnen:

¹Im folgenden wird die Standardkonvention $c=1$, $\hbar=1$ gewählt

²Mit $\mathbb{Z}_L = \mathbb{Z}/(L\mathbb{Z})$ bezeichnet man die L -elementige Restklassengruppe der ganzen Zahlen modulo L .

1. Thermodynamischer Limes:

Die Gitterperiode L wird gegen Unendlich geschickt, so daß die Felder auf einem unendlichen Gitter $(a\mathbb{Z})^4$ leben. Die Gitter-Masse $m = ma$ ($\sim$ inverse Korrelationslänge) ist dimensionslos, und die Masse m sowie die Felder und Kopplungskonstanten lassen sich in Einheiten der dimensionsbehafteten Gitterkonstanten a ausdrücken.

2. Kontinuums-limes:

Im diesem Grenzprozeß ($a \rightarrow 0$) soll die Masse $m = m/a$ konstant auf ihrem physikalischen Wert gehalten werden. Das ist jedoch gleichbedeutend damit, daß die (dimensionslose) Gitter-Korrelationslänge $1/m = 1/(ma)$ gegen Unendlich strebt. Die Kontinuumsfeldtheorie wird demnach im Sinne der statistischen Mechanik durch das Verhalten eines (vierdimensionalen) Gittermodells am kritischen Punkt beschrieben.

Ähnlich wie in der statistischen Physik die Größen bei Annäherung an den kritischen Punkt ($1/m \rightarrow \infty$) Skalenverhalten zeigen, verhält sich eine euklidische Quantenfeldtheorie auf dem Gitter im sogenannten Skalengebiet ($a \rightarrow 0$) annähernd wie eine Kontinuumstheorie.

Im allgemeinen wird in der Literatur (und auch hier) nicht zwischen m und m unterschieden – sprich „die Gitterkonstante ist zu Eins gesetzt“. Durch die Verwendung derselben Bezeichnung m vereinfachen sich die meisten Formeln. Durch die Ersetzung $m \cdot 1 \mapsto m \cdot a$ wird die Gitterkonstante wieder eingeführt.

Die euklidische Formulierung der Φ^4 -Theorie auf einem endlichen Raum-Zeit-Gitter erlaubt die Anwendung numerischer Methoden zur Auswertung des Modells in Form eines Computerexperiments. Da das Pfadintegral der euklidischen Quantenfeldtheorie zu einem Zustandsintegral der statistischen Mechanik äquivalent ist, empfiehlt sich hierzu die Verwendung von Monte-Carlo-Methoden. Durch die numerische Realisierung eines Markov-Prozesses – in dieser Arbeit mit Hilfe des Cluster-Algorithmus – wird dazu ein Ensemble von Gleichgewichts-Feldkonfigurationen erzeugt, die entsprechend des Exponentials der Gitter-Wirkung verteilt sind. Auf diese Weise wird die numerische Auswertung gerade auf die Konfigurationen konzentriert, die mit dem größten Gewicht zum Zustandsintegral beitragen. Erzeugt der Algorithmus aufeinanderfolgend unabhängige Konfigurationen, so lassen sich die Observablen als Erwartungswerte über dem Konfigurationsraum messen. Eine ausführlichere Behandlung der numerischen Methoden erfolgt in Kapitel 4.

3.2 Die Euklidische Wirkung auf dem Gitter

Wir betrachten die N -komponentige $O(N)$ -invariante Φ^4 -Theorie auf einem d -dimensionalen (hyper)kubischen Gitter des Volumens $V = L^d$ ($L \in \mathbb{N}$) mit periodischen Randbedingungen. Die numerischen Simulationen werden zwar für $N = 4$ und $d = 4$ durchgeführt, doch werden alle Beziehungen, die nicht auf diese explizite Parameterwahl zurückgreifen müssen, allgemein gehalten. Die Wirkung für die

Gitterregularisierungen, die in dieser Arbeit untersucht werden, lautet

$$\begin{aligned}
 S\{\vec{\Phi}; J, \kappa, \lambda, \omega\} = & \sum_{x \in (\mathbb{Z}_L)^d} \left\{ -\kappa \sum_{\mu=1}^d \left(\Phi^\alpha(x) \Phi^\alpha(x + \hat{\mu}) + \Phi^\alpha(x) \Phi^\alpha(x - \hat{\mu}) \right) \right. \\
 & - \kappa \omega \sum_{\mu=1}^d \left(\Phi^\alpha(x) \Phi^\alpha(x + 2\hat{\mu}) + \Phi^\alpha(x) \Phi^\alpha(x - 2\hat{\mu}) \right) \\
 & \left. + \lambda \left(\Phi^\alpha(x) \Phi^\alpha(x) - 1 \right)^2 + \Phi^\alpha(x) \Phi^\alpha(x) - J \Phi^N(x) \right\}, \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

wobei $\Phi^\alpha(x)$, $\alpha = 1, \dots, N$, die Komponenten eines reellen $O(N)$ -Vektorfeldes bezeichnet und $\hat{\mu}$ der Einheitsvektor ist, der in positive μ -Richtung zeigt. Gemäß der Summationskonvention wird über doppelt auftretende Indizes α summiert. In den numerischen Simulationen wird $\lambda = \infty$ gesetzt, so daß $\vec{\Phi}(x)$ ein N -komponentiger Vektor der Länge eins ist. Für diesen Wert der nackten Kopplung λ wird der maximale Wert der renormierten Kopplung und somit die obere Schranke für die Masse des Higgs-Bosons erwartet [32]. Im letzten Term wird das Feld an eine äußere Quelle J gekoppelt, die die $O(N)$ -Symmetrie explizit bricht. Hiervon wird im zweiten Teil der Arbeit Gebrauch gemacht. Mit Werten $\omega \neq 0$ kann zusätzlich zur Nächsten-Nachbar-Wechselwirkung eine Kopplung über zwei Gitterplätze angestellt werden. Wird $\omega = 0$, $J = 0$ und/oder $\lambda = \infty$ gesetzt, so wird im folgenden die entsprechende Parameterangabe in $S\{\dots\}$ weggelassen.

Wird ein dimensionsbehaftetes Feld $\vec{\phi}$ sowie eine entsprechende äußere Quelle j eingeführt:

$$\phi^\alpha(ax) = \sqrt{2\kappa} \sqrt{1+4\omega} \Phi^\alpha(x) a^{1-d/2}, \quad (3.4)$$

$$j = \frac{1}{\sqrt{2\kappa} \sqrt{1+4\omega}} J a^{-d/2-1}, \quad (3.5)$$

so erhält man die Wirkung in einer kontinuumsartigen Parametrisierung (bis auf irrelevante Konstanten):

$$\begin{aligned}
 S\{\vec{\phi}; j, m_0^2, g_0, \omega\} = & a^d \sum_{x \in (\mathbb{Z}_L)^d} \left\{ \frac{1}{1+4\omega} \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \hat{\partial}_\mu \phi^\alpha \hat{\partial}_\mu \phi^\alpha \right. \\
 & + \frac{4\omega}{1+4\omega} \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \hat{\partial}_{2\mu} \phi^\alpha \hat{\partial}_{2\mu} \phi^\alpha \\
 & \left. - \frac{1}{2} m_0^2 \phi^\alpha(ax) \phi^\alpha(ax) + \frac{g_0}{4!} \left(\phi^\alpha(ax) \phi^\alpha(ax) \right)^2 - j \phi^N(ax) \right\} \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

mit³

$$a^2 m_0^2 = \frac{1}{1+4\omega} \left[\frac{2\lambda-1}{\kappa} + 2d(1+\omega) \right], \quad (3.7)$$

$$a^{4-d} g_0 = \frac{1}{(1+4\omega)^2} \frac{6\lambda}{\kappa^2}. \quad (3.8)$$

³Das Vorzeichen des Massenparameters ist hier entgegen der Konvention in der meisten Literatur auf die gebrochene Phase abgestimmt.

Die Gitterkonstante a , die in diesem Schritt (vorübergehend) eingeführt worden ist, ist der Regularisierungsparameter, in dessen Einheiten sich alle physikalischen Größen ausdrücken lassen.

Abkürzend wird hier für den Differenzenquotienten – vor dem Kontinuumslimites –

$$\hat{\partial}_{n\mu} \phi^\alpha = \frac{\phi^\alpha(ax + na\hat{\mu}) - \phi^\alpha(ax)}{na} \quad (3.9)$$

geschrieben. Zur Vereinfachung der Formeln wird der Gitterabstand a im folgenden wieder zu 1 gesetzt. Er kann – und wird, wenn dies zur Veranschaulichung vonnöten ist – wieder eingeführt werden, indem alle Größen gemäß den Gleichungen (3.4), (3.5), (3.7) und (3.8) in Gittereinheiten ausgedrückt werden.

In der Störungstheorie der gebrochenen Phase wird das Funktionalintegral um das (konstante) Minimum $\vec{\phi} = (0, \dots, 0, s_N)$ der Standard-Gitterwirkung $S\{\vec{\phi}; j, m_0^2, g_0\}$ entwickelt, d.h. s_N ist positive Lösung von

$$s_N \left(\frac{g_0}{6} s_N^2 - m_0^2 \right) = j. \quad (3.10)$$

Die Wirkung besitzt dann (bis auf Konstanten) ausgedrückt durch die Fluktuationfelder $\pi^b = \phi^b$, $\sigma = \phi^N - s_N$ folgende Gestalt

$$\begin{aligned} S\{\vec{\pi}, \sigma; m_{\pi,0}^2, m_{\sigma,0}^2, g_0\} = \sum_{x \in (\mathbb{Z}_L)^d} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \left(\hat{\partial}_\mu \pi^b \hat{\partial}_\mu \pi^b + \hat{\partial}_\mu \sigma \hat{\partial}_\mu \sigma \right) \right. \\ + \frac{1}{2} m_{\pi,0}^2 \pi^b(x) \pi^b(x) + \frac{1}{2} m_{\sigma,0}^2 \sigma(x) \sigma(x) \\ + \frac{1}{3!} \sqrt{3g_0(m_{\sigma,0}^2 - m_{\pi,0}^2)} \sigma(x) \left(\pi^b(x) \pi^b(x) + \sigma(x) \sigma(x) \right) \\ \left. + \frac{g_0}{4!} \left(\pi^b(x) \pi^b(x) + \sigma(x) \sigma(x) \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Der lateinische Summationsindex b läuft nur von 1 bis $N-1$. Eine Form dieser Art besitzt die Wirkung auch noch, wenn man renormierte Felder und Parameter eingeführt hat, die äußere Quelle $j=0$ setzt und/oder im Zustandsintegral die Integration über die Impuls-Null-Mode abspaltet (s. Abschn. 5.3). Die hierbei eingeführten Abkürzungen

$$m_{\pi,0}^2 = s_N^2 \frac{g_0}{6} - m_0^2 = \frac{j}{s_N}, \quad (3.12)$$

$$m_{\sigma,0}^2 = s_N^2 \frac{g_0}{2} - m_0^2 = 2m_0^2 + 3m_{\pi,0}^2 \quad (3.13)$$

beschreiben zunächst nur auf dem Baumgraphen-Niveau der Störungstheorie die Massenquadrate der Pionen und des σ -Teilchen. Entsprechende Beziehungen erhält man bei Einführung von Renormierungsbedingungen. Dabei müssen skalenverletzende Effekte berücksichtigt und Abweichungen zwischen den renormierten und den physikalischen Massen beachtet werden, wobei letztere mit den Polen der entsprechenden Propagatoren zusammenhängen.

Mit den drei Schreibweisen der Wirkung, der Gitterformulierung (3.3), der Kontinuumsversion (3.6) und der störungstheoretischen Form (3.11) (nur in der gebrochenen Phase) gehen folgende Parameterwechsel der nackten Parameter einher:

$$(\kappa, J, \lambda) \mapsto (m_0^2, j, g_0) \mapsto (m_{\sigma,0}^2, m_{\pi,0}^2, g_0). \quad (3.14)$$

Zu einer masselosen, wechselwirkungsfreien Theorie ($m_0^2 = 0$, $j = 0$, $g_0 = 0$) gehören die Gitter-Parameter ($\kappa = 1/2d$, $J = 0$, $\lambda = 0$). Den Limites $m_0^2 \rightarrow -\infty$ und $m_0^2 \rightarrow +\infty$ bei festgehaltenem g_0 und ($j = 0$) entsprechen $\kappa \rightarrow 0^+$ bzw. $\kappa \rightarrow \infty$ (s. Gleichungen (3.7) und (3.8)).

Die numerischen Simulationen greifen auf die Gitterwirkung $S\{\vec{\Phi}; J, \kappa, \omega\}$ (3.3) des nichtlinearen σ -Modells ($\lambda = \infty$) zurück. Zur Diskussion des Skalenverhaltens und zur Erläuterung des Konzeptes der *verbesserten* Wirkungen eignet sich die Kontinuumsversion $S\{\phi; j, m_0^2, g_0, \omega\}$ (s. Gl. 3.6) am besten. Sie ist auch Basis der störungstheoretischen Entwicklung in der symmetrischen Phase (mit $m_0^2 < 0$). Ausgangspunkt der störungstheoretischen Untersuchungen in der gebrochenen Phase ist die Wirkung (3.11). Da die skalenverletzenden Effekte – wie sich gezeigt hat – auf dem 1-Schleifen-Niveau der Störungstheorie im untersuchten Bereich vernachlässigbar sind, kann man sich bei den störungstheoretischen Rechnungen in Kap. 5 auf die Standard-Wirkung mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung beschränken. Bei der Analyse der Volumenkorrekturen zeigt sich, daß sogar Kontinuumsintegrale verwendet werden können.

3.3 Das Konzept der verbesserten Wirkungen

Ziel numerischer Rechnungen auf endlichen euklidischen Gittern ist es, das kontinuumsartige Verhalten des Modelles zu studieren, d.h. die physikalische Skala, beschrieben durch die Korrelationslänge $\xi = 1/(ma)$, soll nicht von der Gitterstruktur aufgelöst werden, $\xi \gg 1$. Einen Ansatz, dieses sogenannte Skalenverhalten zu optimieren, stellen die *verbesserten* Wirkungen dar [38, 39, 33, 29].

Falls $\langle \dots \rangle_a$ den Erwartungswert bei endlicher Gitterkonstante a bezeichnet und entsprechend $\langle \dots \rangle_0$ für den Kontinuumslimites steht, dann gilt im allgemeinen [38]

$$\left| \langle \phi_1(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle_a - \langle \phi_1(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle_0 \right| \leq (ma)^k \cdot P(\ln(ma)). \quad (3.15)$$

Dabei definiert m die physikalische Massenskala, $P(\ln(ma))$ ist ein Polynom in $\ln(ma)$, und es gilt in der Regel $k = 2$ für den Fall der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie. Hieran erkennt man, daß zwar die skalenverletzenden Effekte vermieden werden, wenn die Korrelationslänge $\xi = 1/(ma)$ relativ groß im Vergleich zum Gitterabstand ist, doch geht dies auf Kosten größerer Volumeneffekte, falls die Gitterausdehnung L nicht groß genug gegenüber der physikalischen Skala ξa ist. Dies veranschaulicht, inwiefern skalenverletzenden Effekte (ma -Effekte) und Volumeneffekte (mL -Effekte) gegenläufig sind.

Die simulierbaren Gittergrößen L/a sind aufgrund der Computerressourcen beschränkt. Auf die damit in Verbindung stehenden Volumenkorrekturen wird später

in Kapitel 5 eingegangen. Auf der anderen Seite lassen sich aber durch die Einführung sogenannter *verbesselter* Wirkungen die Skalenkorrekturen auf die Ordnung $\mathcal{O}(a^4 \ln a)$ reduzieren, so daß auch mit größeren Werten ma (und damit mL) zuverlässige Ergebnisse erzielt werden können.

Die Idee geht auf Symanzik [38] zurück: Zur Gitterwirkung wird, mit dem Ziel, das Konvergenzverhalten der Theorie im Kontinuumslimites zu *verbessern*, eine endliche Anzahl Terme addiert, die formal der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ sind. Dazu wird eine effektive Lagrangedichte aufgestellt, die alle Monome der Felder und ihrer Ableitungen bis zu einer gegebenen Ordnung enthält, die die Gittersymmetrie respektieren und bei Impuls Null linear unabhängig sind. Die Koeffizienten werden in renormierter Störungstheorie so festgelegt, daß die o.a. Gittereffekte bis zu einer gegebenen Ordnung verschwinden.

Für kleine Werte der renormierten Kopplung g_R können die renormierten Vertexfunktionen, d.h. die 1-Teilchen-irreduziblen, zusammenhängenden n -Punkt-Greensfunktionen, in Potenzen von g_R entwickelt werden. Die Koeffizienten sind endliche Summen von Gitter-Feynman-Diagrammen, deren Kontinuumslimites existiert und für alle Gitter-Wirkungen gleich ist [34]. Störungstheoretisch wird die Konvergenzrate für den Kontinuumsrenzprozeß durch die asymptotische Formel

$$a \frac{\partial}{\partial a} \Gamma_R^{(n)} = \mathcal{O}(a^k \cdot (\ln a)^r) \quad (3.16)$$

beschrieben [38], wobei r von der maximal betrachteten Schleifenordnung abhängt und $k=2$ für die Standard-Wirkung ist. Hierbei sind alle Größen, die in Gittereinheiten ausgedrückt sind, auch die Vertexfunktionen ($\Gamma_R^{(n)} = a^{n-4} \Gamma_R^n$), durch dimensionsbehaftete, im Kontinuumslimites endliche Größen ersetzt worden.

Gleichung (3.16) bietet zwei Interpretationsansätze:

- Sobald der Abschneideparameter a^{-1} einige Größenordnungen größer als die auftretenden Massen und Impulse ist, sind die skalenverletzenden Effekte (auch schon bei $k=2$) zu vernachlässigen, d.h. das Kontinuumsverhalten setzt ein.
- Die skalenverletzenden Effekte der Ordnung $\mathcal{O}(a^k)$ hängen allerdings von der gewählten Gitter-Wirkung ab. Dies ist der Ansatzpunkt für Symanzik's Programm der verbesserten Gitterwirkungen: Mit *verbesserten* Wirkungen [39] wird in der r -Schleifen-Ordnung der renormierten Störungstheorie die Abhängigkeit von der Skala a von einer Potenz $k=2$ für die Standard-Wirkung auf eine Potenz $k=4$ reduziert.

So ist es auf störungstheoretischem Niveau möglich, die skalenverletzenden Terme der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ in allen physikalischen Größen durch die Wahl einiger weniger freier Parameter in der *verbesserten* Wirkung verschwinden zu lassen. Technisch gesehen kann das Verbesserungs-Programm für Gitterwirkungen als Erweiterung des Renormierungsgedankens betrachtet werden, bei dem weitere Terme mit höherer Dimension der Operatoren und – wie in Gleichung (3.3) geschehen – Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung zur Wirkung addiert werden. Die zunächst freien Koeffizienten der Terme werden durch die Forderung festgelegt, die Potenz k der skalenverletzenden Effekte in den Beziehungen (3.16) zu erhöhen.

In dieser Arbeit wird eine nur auf dem Baumgraphen-Niveau verbesserte Symanzik-Wirkung verwendet (s.u.). Auf dem 1-Schleifen-Niveau ergibt sich eine 2parametrische Schar von *verbesserten* Wirkungen [39], und G. Keller et al. stellen ein rigoroses Verfahren zur Konstruktion verbesserter Wirkungen für die vierdimensionale einkomponentige Φ^4 -Theorie vor [29]. Die erwartete Verbesserung ist in anderen Theorien, wie z.B. der Gitterformulierung der QCD, nützlicher, da hier eine Reduzierung der skalenverletzenden Effekte von der Ordnung $\mathcal{O}(a)$ auf $\mathcal{O}(a^2)$ erzielt werden kann [36]. Numerische Untersuchungen hierzu werden u.a. von der UKQCD-Kollaboration ausgeführt (s. beispielsweise [23]).

Die Gitterregularisierung bewirkt eine Verletzung der Rotationsinvarianz aller Größen, da jene Richtungen, in denen die Wechselwirkung mit den Gitter-Nachbarn definiert ist, ausgezeichnet sind. Diese sollte umso geringer ausfallen, je mehr sich die Kopplung κ dem kritischen Wert κ_c nähert. Es ist also eine wichtige Bedingung, daß bei $\kappa = \kappa_c$ die Rotationssymmetrie vollständig wiederhergestellt sein muß, wenn am kritischen Punkt eine Kontinuumstheorie beschrieben werden soll. Eine in diesem Sinne *verbesserte* Gitterwirkung wird z.B. auf einem F_d -Gitter definiert [90, 84], auf dem jeder Gitterpunkt $2d(d-1)$ (24 für $d=4$) nächste Nachbarn besitzt. Die Gitter F_d entsprechen in Abhängigkeit von der Dimension d den Wurzelgittern der Lie-Algebren C_d ($d \neq 4$) bzw. F_4 ($d=4$). Die diskreten Drehgruppen dieser Gitter sind die Weyl-Gruppen der entsprechenden Lie-Algebra. Die F_4 -Gitter sind analytisch wie auch numerisch von der Arbeitsgruppe G. Bhanot, K. Bitar, U.M. Heller und H. Neuberger untersucht worden [84, 85]. Eine detaillierte Studie der Rotationsinvarianz bei unterschiedlichen Gitterregularisierungen ist von U. Winkler und C.B. Lang durchgeführt worden [89] (mehr dazu in Kap. 7).

Neben der Standard-Wirkung mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung, für die der Kopplungsparameter ω in der Gitterwirkung $S\{\tilde{\Phi}; J, \kappa, \omega\}$ zu Null gesetzt wird, untersucht diese Arbeit auch eine im Sinne Symanziks verbesserte Wirkung. Dafür wird ω so gewählt, daß die Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(a^2)$ in der Gitterdispersionsrelation verschwinden. Der inverse freie Propagator im Impulsraum ist entsprechend dem kinetischen Term in der Wirkung (3.3) durch

$$\Gamma^{(2)}(p, -p) = 2\kappa \left\{ (1 + 4\omega) m^2 + \hat{p}^2 + \omega \hat{p}^2 \right\} \quad (3.17)$$

$$= 2\kappa (1 + 4\omega) \left\{ m^2 + \sum_{\mu=1}^d (p_\mu)^2 \left[1 - \frac{(p_\mu a)^2 (1 + 16\omega)}{12 (1 + 4\omega)} \right] \right\} + \mathcal{O}(a^4),$$

gegeben, wobei

$$\hat{p}^2 = \frac{4}{a^2} \sum_{\mu=1}^d \sin^2 \left(\frac{p_\mu a}{2} \right). \quad (3.18)$$

Mit

$$\omega = -\frac{1}{16} \quad (3.19)$$

werden die skalenverletzenden Effekte in Gl. (3.16) (im Baumgraphen-Niveau der Störungstheorie) auf die Ordnung $\mathcal{O}(a^4)$ reduziert.

Auf weitere analytische Ergebnisse, insbesondere in Verbindung mit der Regularisierungsabhängigkeit der oberen Schranke für die Higgs-Boson-Masse, wird in Kapitel 7 eingegangen.

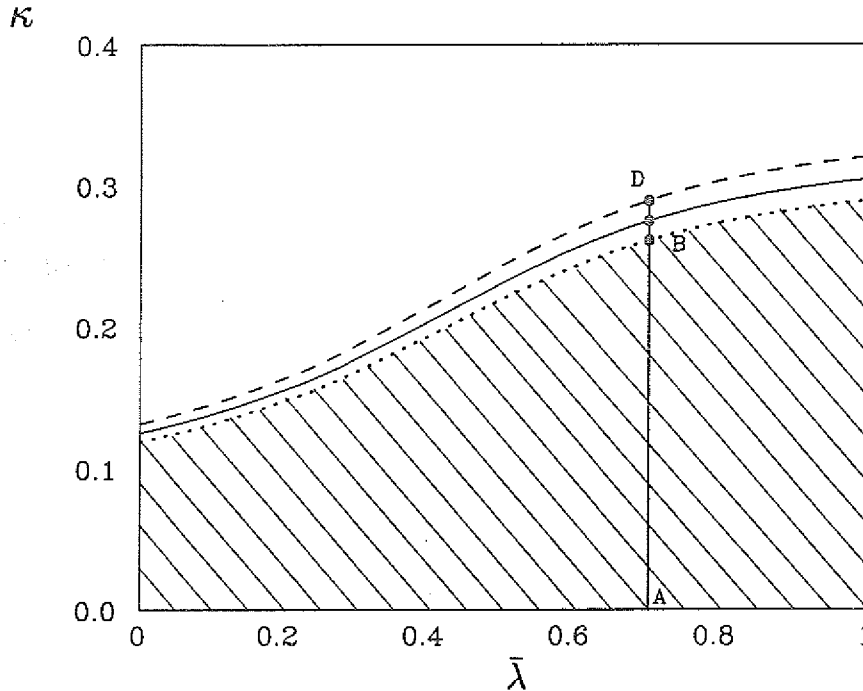


Abbildung 3.1: Phasendiagramm der 4dimensionalen $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie im Fall der Standard-Wirkung nach Tabelle 1 aus [32]. Die durchgezogene Linie $\kappa_c(\lambda)$ beschreibt den Phasenübergang zweiter Ordnung. Gepunktet bzw. gestrichelt sind die Kurven $\kappa = 0.98\kappa_c$ und $\kappa = 1.02\kappa_c$ eingezeichnet.

VERWENDETE RECHENMETHODEN IN [30–32]

$\kappa \in [0, \kappa_B]$	:	Hochtemperaturentwicklung (schraffierter Bereich)
$\kappa \in [\kappa_B, \kappa_c)$	:	Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen
$\kappa \approx \kappa_c$	:	Störungstheorie in der Masse
$\kappa \in (\kappa_c, \kappa_D]$	:	Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen

3.4 Die analytische „Lösung“ der Φ^4 -Theorie von Lüscher und Weisz

Das Ziel der Arbeiten von M. Lüscher und P. Weisz [30–32] ist gewesen, die Renormierungsgruppen-Trajektorien (Kurven konstanter renormierter Kopplung g_R) in der Ebene der nackten Parameter (κ, λ) bzw. (m_0^2, g_0) zu finden und somit den maximalen Wert von Λ/m_R für gegebenes g_R – sprich die Trivialitätsschranke an die Higgs-Masse – abzulesen. Dazu verwenden sie eine Entwicklung für kleine Werte des hopping-Parameters κ (auch „Hochtemperaturentwicklung“ oder „linked cluster expansion“ genannt) in Kombination mit einer Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen mit Renormierungsgruppen-Funktionen, die störungstheoretisch berechnet werden.

Das Lösungsschema von Lüscher und Weisz [32] startet in der symmetrischen Phase mit einer κ -Entwicklung der Größen X (z.B. der renormierten Masse m_R) bei festgehaltener Selbstkopplung λ [31]:

$$X = \sum_{n=0}^{\infty} X_n \frac{(2\kappa)^n}{n!}. \quad (3.20)$$

Diese (konvergente) Hochtemperatur-Entwicklung wird möglichst nahe bis an die kritische Linie $\kappa_c(\lambda)$ herangeführt. Jedoch nimmt die Konvergenzrate bei Annäherung an κ_c ab. Der Konvergenzradius der Entwicklung bestimmt die kritische Linie $\kappa_c(\lambda)$. Für die hier untersuchte vierdimensionale $O(4)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie ist das auf diese Weise berechnete Phasendiagramm in Abbildung 3.1 dargestellt. Wird die Reihe bei $n=14$ abgebrochen [32], so werden bis $\kappa=0.98\kappa_c$ Resultate X mit akzeptablen Fehlern erzielt. Statt λ ist hier eine Kumulante 4. Ordnung⁴ $\bar{\lambda}$ aufgetragen, wobei sich $\bar{\lambda}=1$ und $\lambda=\infty$ entsprechen.

An der Linie $\kappa(\lambda)=0.98\kappa_c(\lambda)$ (gepunktete Kurve in Abb. 3.1) liefert die Hochtemperatur-Entwicklung die Startwerte für eine Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen. Dies sind Differentialgleichungen erster Ordnung, die die Entwicklung von Größen X , wie beispielsweise der renormierten σ -Masse m_R oder der renormierten Kopplung g_R , entlang von Trajektorien mit konstanter Selbstkopplung λ bis zur kritischen Linie $\kappa_c(\lambda)$ beschreiben. Die zugehörigen Renormierungsgruppen-Funktionen können – zunächst nur in der symmetrischen Phase – in renormierter Störungstheorie berechnet werden, da die renormierte Kopplung g_R als Ergebnis der Hochtemperatur-Entwicklung bei Annäherung an die kritische Linie verschwindet. Auf diese Weise können die Größen X in Potenzen der renormierten Kopplung g_R entwickelt werden, symbolisch geschrieben in der Form:

$$X = \sum_{n=0}^{\infty} X_n(m_R) g_R^n, \quad (3.21)$$

Die Koeffizienten $X_n(m_R)$ hängen von der renormierten Masse m_R ab. Wenn die Kopplung g_R einmal so klein ist, daß die Störungstheorie zur Berechnung der Callan-Symanzik- β -Funktion anwendbar wird, so nimmt sie mit kleiner werdender Masse m_R noch kleinere Werte an, da die β -Funktion – zumindest bis zur 3-Schleifen-Ordnung – positiv ist (s. auch Abschn. 5.3.5). Dies bedeutet, daß der Annäherungsprozeß an die kritische Linie nicht aus dem störungstheoretischen Bereich herausführen kann. Die Φ^4 -Theorie in vier Dimensionen besitzt nur den trivialen Fixpunkt, d.h. sie wird eine freie Feldtheorie. Die Integration der 2-Schleifen- β -Funktion ergibt, für am_R

$$am_R = C \left(\frac{1}{\beta_1 g_R} \right)^{\beta_2/\beta_1^2} \exp \left(- \frac{1}{\beta_1 g_R} \right) \quad (3.22)$$

Hierbei sind die positiven Koeffizienten β_1 und β_2 von der Wahl des Renormierungsschemas unabhängig.

Der wesentliche Schritt des Überganges über die kritische Linie $\kappa_c(\lambda)$ in die gebrochene Phase erfolgt durch Definition einer masselosen renormierten Theorie entlang

⁴Ähnlich wie die Binder-Kumulante für die Energie, hier allerdings für die Magnetisierung.

der kritischen Linie und durch Verwendung einer Störungstheorie mit der Masse als Entwicklungsparameter [86]. Dabei stellt sich heraus, daß die führenden Konstanten, die das Skalenverhalten beiderseits der kritischen Linie beschreiben, proportional zueinander sind. Die zugehörigen Renormierungsgruppen-Funktionen können also auch in der gebrochenen Phase in renormierter Störungstheorie berechnet werden. Allerdings muß die Integration in der gebrochenen Phase für eine Kopplung g_R weit genug unterhalb der Baumgraphen-Unitaritätsschranke abgebrochen werden. Es stellte sich dabei heraus, daß der Bereich $am_R \lesssim 1/2$ ($\Lambda \gtrsim 2m_R$) dabei eingeschlossen ist, oberhalb dessen die universellen physikalischen Eigenschaften des Modells auf Kosten von Gittereffekten (synonym mit *cutoff*-Effekten oder skalenverletzenden Effekten) verloren gehen.

Die numerischen Ergebnisse dieser Arbeit werden in den folgenden Kapiteln mit den „Vorhersagen“ von Lüscher und Weisz in der Skalenregion der gebrochenen Phase verglichen.

Kapitel 4

Numerische Methoden

Zur numerischen Auswertung einer Quantenfeldtheorie werden die Erwartungswerte der zu untersuchenden Operatoren mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen auf endlichen Gittern berechnet.

Der hier verwendete nichtlokale Clusteralgorithmus [60, 62, 66] stellt ein mächtiges Hilfsmittel dar, numerische Daten mit sehr hoher Präzision zu erhalten [50]. Um die bei einigen festen Werten des *hopping*-Parameters κ gemessenen Daten zu benachbarten κ -Werten analytisch fortzusetzen, wird die sogenannte Histogramm-Methode [47, 48] verwendet. Zusammen ermöglichen beide numerischen Methoden eine Untersuchung des Modelles insbesondere im kritischen Bereich, in dem ein kontinuierartiges Verhalten (Skalenverhalten) der Theorie erwartet wird.

4.1 Grundlagen

Ausgehend von einer zufälligen Anfangskonfiguration $\{\phi_0\}$ des Systems wird mit einer geeigneten Übergangswahrscheinlichkeit $\bar{P}(\phi_i \rightarrow \phi_{i+1})$ eine Sequenz von Feldkonfigurationen $\{\phi_i | i=0, \dots, n\}$ erzeugt. Wird dieses Ensemble von n Feldkonfigurationen mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden gemäß einer Boltzmann-Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(\phi) = \frac{1}{Z} e^{-S(\phi)} \quad (4.1)$$

generiert und sind die einzelnen Konfigurationen paarweise unabhängig voneinander, so ist der Mittelwert $\bar{Q}$ einer Observablen Q , der durch Mittelung über das Ensemble $\{\phi_i | i=0, \dots, n\}$ erhalten wird,

$$\bar{Q} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q(\phi_i), \quad (4.2)$$

ein guter Schätzwert für den statistischen Erwartungswert $\langle Q \rangle$ dieser Größe:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi Q(\phi) e^{-S(\phi)}, \quad (4.3)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}. \quad (4.4)$$

Je größer das Ensemble von Konfigurationen ist, desto besser ist der Schätzwert. Im Grenzfall einer unendlich großen Stichprobe ($n \rightarrow \infty$) wird diese Beziehung zwischen dem Schätzwert $\bar{Q}$ und dem Erwartungswert $\langle Q \rangle$ durch

$$\langle Q \rangle = \bar{Q} + \mathcal{O}(1/\sqrt{n}) \quad (4.5)$$

beschrieben. Die Boltzmannfaktoren müssen reell und dürfen nicht negativ sein.

Den Algorithmen zur Erzeugung einer Sequenz von Zufalls-Feldkonfigurationen $\{\phi_i; i=0, \dots, n\}$ liegt ein verallgemeinerter stochastischer Prozeß, der Markov-Prozeß [58], zugrunde, der bereits vollständig durch die Anfangsverteilung $P(\phi)$ und durch die bedingte Wahrscheinlichkeit $\bar{P}(\phi \rightarrow \phi')$ festgelegt ist. Innerhalb einer Markov-Kette ist jede Konfiguration nur von der unmittelbar vorangehenden abhängig. Man sagt auch, der Markov-Prozeß habe kein *Gedächtnis*. Die den Prozeß charakterisierende Übergangswahrscheinlichkeit $\bar{P}(\phi \rightarrow \phi')$ muß folgende Eigenschaften besitzen:

„Ergodizität“¹

Es muß gewährleistet sein, daß für $n \rightarrow \infty$ tatsächlich alle Feldkonfigurationen – auch die unwichtigsten – erzeugt werden: Für jedes Paar von Feldkonfigurationen $(\{\phi\}, \{\phi'\})$ gibt es spätestens nach $n \geq 0$ Markov-Schritten eine Übergangswahrscheinlichkeit $\bar{P}^{(n)}(\phi \rightarrow \phi') > 0$: „Jede beliebige Konfiguration kann aus jeder Konfiguration erhalten werden“.

Gleichgewichtsbedingung

Gleichgewichts-Feldkonfigurationen $P(\phi) = Z^{-1}e^{-S(\phi)}$ werden wieder in Gleichgewichts-Konfigurationen überführt²:

$$\int \mathcal{D}\phi \bar{P}(\phi \rightarrow \phi') e^{-S(\phi)} = e^{-S(\phi')}. \quad (4.6)$$

Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (*detailed balance*) an die Übergangswahrscheinlichkeit $\bar{P}(\phi \rightarrow \phi')$

$$e^{-S(\phi)} \bar{P}(\phi \rightarrow \phi') = e^{-S(\phi')} \bar{P}(\phi' \rightarrow \phi) \quad (4.7)$$

ist hierfür hinreichend (aber nicht notwendig).

Da in der statistischen Physik oder Quantenfeldtheorie in der Regel lokale Hamilton- oder Lagrange-Dichten studiert werden, ist die Verwendung lokaler Algorithmen zur Aufdatierung des Systems am naheliegendsten. Die zwei bekanntesten lokalen Algorithmen sind der Wärmebad (*heat bath*) und der Metropolis-Algorithmus [56]. Bei lokalen Aufdatierungen ändern sich die Konfigurationen jedoch nur geringfügig, so daß mehrere aufeinanderfolgende Aufdatierungen notwendig sind, um eine neue Konfiguration zu erhalten, die von der Ausgangskonfiguration unabhängig ist. Dieses Problem verschlimmert sich bei Annäherung an den kritischen Punkt. Ein Maß für

¹Die Anführungsstriche sollen auf die unterschiedliche Bedeutung des Begriffes Ergodizität in der physikalischen bzw. mathematischen Literatur hinweisen. Für Markov-Ketten (in einem endlichen Phasenraum) bedeutet Ergodizität Irreduzibilität [59].

²Es wird darauf hingewiesen, daß diese Gleichung auch als eine Eigenwert-Gleichung mit Eigenwert 1 und Eigenvektor $e^{-S(\phi)}$ gesehen werden kann [65]

den exponentiellen Abfall der Korrelation aufeinanderfolgender Konfigurationen ist die Autokorrelationszeit τ .

Zur Bestimmung der Autokorrelationszeit mißt man auf einem Ensemble von n aufeinanderfolgenden Konfigurationen die normierte abfallende Autokorrelationsfunktion für eine Observable $\mathcal{Q}$ [59]:

$$C(t) = \frac{\sum_{i=1}^n (\mathcal{Q}_{i+t} - \overline{\mathcal{Q}}) (\mathcal{Q}_i - \overline{\mathcal{Q}})}{\sum_{i=1}^n (\mathcal{Q}_i - \overline{\mathcal{Q}})^2}. \quad (4.8)$$

Für große Computer-Zeiten t (das ist die diskrete Menge von Zeitpunkten $t = 1, \dots, n$, an denen in der Computersimulation der Operator $\mathcal{Q}$ gemessen wird) erwartet man einen exponentiellen Abfall $C(t) \sim e^{-t/\tau_{exp}}$, beschrieben durch die exponentielle Autokorrelationszeit τ_{exp} . In der Regel setzt sich $C(t)$ jedoch aus einer Überlagerung unterschiedlicher Moden zusammen. Deshalb ist für den statistischen Fehler der Erwartungswerte die integrierte Autokorrelationszeit

$$\tau_{int} \approx \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^n C(t) \quad (4.9)$$

($\tau_{int} \lesssim \tau_{exp}$) maßgeblich. Untersucht man die Varianz von $\mathcal{Q}$, so läßt sich zeigen, daß der Abstand zwischen zwei statistisch unabhängigen Konfigurationen gerade $2\tau_{int}$ beträgt [59]. D.h. die Anzahl unabhängiger Konfigurationen verringert sich von n auf $n/(2\tau_{int})$.

Die Autokorrelationszeit wächst mit divergierender Korrelationslänge ξ (bzw. der Gitterausdehnung L) an. Dieses Verhalten wird in der englischsprachigen Literatur mit „critical slowing down“ bezeichnet und durch den kritischen Exponenten z beschrieben:

$$\tau \sim \min\{\xi, L\}^z. \quad (4.10)$$

Es läßt sich zeigen, daß für lokale Algorithmen $z \gtrsim 2$ ist³. Betrachtet man das Gaußsche Modell als Zufallsbewegung eines Brownschen Teilchens, wird klar, daß in lokalen Algorithmen die „Information“ in einem Iterationsschritt nur bis zu den nächsten Nachbarn eines Gitterpunktes transportiert werden kann. Um eine wesentliche Änderung der Konfiguration zu erreichen, muß die „Information“ einen Abstand von der Größenordnung der Korrelationslänge ξ zurücklegen, was mit Brownscher Bewegung in $\sqrt{\tau}$ Schritten möglich ist.

Will man kleinere Werte für z , idealerweise $z \approx 0$, erreichen, so müssen größere Bereiche der Feldkonfigurationen in einem Schritt geändert werden. Hierfür sind nichtlokale Algorithmen, wie der Clusteralgorithmus, erforderlich, die den langreichweitigen Fluktuationen des Systems bei großen Korrelationslängen gerecht werden. Die mittlere Clustergröße ist beim Clusteralgorithmus von der Größenordnung der Korrelationslänge; so ist verständlich, daß $z \gtrsim 0$ ist [50, 63]. Weitere Algorithmen, die dieses Problem in den Griff zu bekommen versuchen, benutzen z.B. Mehrgitter

³Für infrarot-superrenormierbare Modelle (z.B. Φ^4 -Theorie in $d > 4$) ist $z = 2$ exakt. In infrarot-asymptotisch freien Theorien (z.B. Φ^4 -Theorie in $d = 4$) ist $z = 2$ modulo eines Logarithmus [51].

Methoden (engl. *multigrid*) [43] oder Überrelaxations-Verfahren (engl. *overrelaxation*) [42, 65].

Um (weitgehend) unabhängige Konfigurationen zu erzeugen, wird in der vorliegenden Arbeit der Reflexions-Clusteralgorithmus [62] verwendet: im ersten Teil ohne und im zweiten mit äußerer Quelle. Für die Simulationen zum ersten Teil muß der Clusteralgorithmus zusätzlich für die Behandlung kinetischer Terme mit Kopplungen über zwei Gitterplätze verallgemeinert werden, die in der Symanzik-Verbesserten Wirkung (s. Gl. (3.3)) vorkommen.

4.2 Clusteralgorithmus

Der Reflexions-Cluster-Algorithmus, der für das nichtlineare $O(N)$ - σ -Modell von U. Wolff entwickelt worden ist [62], basiert auf zwei Teilaspekten [45]:

1. Zunächst werden an jedem Gitterpunkt $\mathbb{Z}_2$ -Ising-Spins $\{\sigma(x)\}$ in die Felder $\{\vec{\Phi}(x)\}$ aus der fundamentalen Darstellung der $O(N)$ eingebettet.
2. In einem zweiten Schritt kann das Ising-Modell mit den Spinvariablen $\{\sigma(x)\}$ mittels des Multi-Cluster-Algorithmus nach Swendsen und Wang [60] oder mit der 1-Cluster-Methode nach Wolff [62] simuliert werden. Dabei werden ganze Spinbereiche (sogenannte *cluster*) gleichzeitig aufdatiert.

4.2.1 Einbettung

Ziel der Einbettung ist, die globalen Symmetrien der Wirkung auszunutzen, um eine Unterteilung des Gitters in Cluster zu ermöglichen. Die kollektive Änderung aller Felder eines Clusters sollte möglichst unkorrelierte Schritte im Konfigurationsraum begünstigen, muß aber außerdem ergodisch sein und die Bedingung (4.6) erfüllen. Als besonders günstige Einbettung in diesem Sinne erweist sich im nichtlinearen $O(N)$ - σ -Modell (bei $J = 0$) die Einführung von Ising-Feldern $\sigma_{\vec{r}}(x) = \pm 1$ aus dem Normalteiler $\mathbb{Z}_2$ der kontinuierlichen $O(N)$ -Symmetriegruppe: Sowohl die Ising-Felder $\sigma_{\vec{r}}(x)$ an den Gitterplätzen, die zu Clustern zusammengefaßt werden, als auch die Produkte $\sigma_{\vec{r}}(x)\sigma_{\vec{r}}(y)$ auf den Gitterkanten $\langle xy \rangle$ im Wechselwirkungsterm können nur die Werte ± 1 annehmen. Letzteres ist für die Clusteroberflächen relevant.

Die Einschränkung der kontinuierlichen $O(N)$ -Symmetriegruppe auf die Spiegelungen wäre natürlich nicht ergodisch, wenn nicht aufgrund der globalen $O(N)$ -Symmetrie in der Wirkung und dem Maß $\mathcal{D}\Phi = \prod_x d^n\Phi(x) \delta(\vec{\Phi}(x)^2 - 1)$ die Freiheit bestünde, die Felder bezüglich eines zufällig gewählten Einheitsvektors $\vec{r}$ aus der Sphäre S^{N-1} auszurichten. Das Feld $\vec{\Phi}(x)$ läßt sich in die Komponenten $\vec{\Phi}_{\perp}(x) = \vec{\Phi}(x) - (\vec{\Phi} \cdot \vec{r})\vec{r}$ und $\vec{\Phi}_{\parallel}(x) = (\vec{\Phi} \cdot \vec{r})\vec{r}$ senkrecht bzw. parallel zur Richtung $\vec{r}$ zerlegen. Die Ising-Variable $\sigma_{\vec{r}}(x) = \pm 1$ wird als das Vorzeichen der Projektion des Feldes $\vec{\Phi}$ auf die $\vec{r}$ -Richtung definiert:

$$\sigma_{\vec{r}}(x) \equiv \text{sign}(\vec{\Phi}(x) \cdot \vec{r}). \quad (4.11)$$

Einem Vorzeichenwechsel des Ising-Spins $\sigma_{\vec{r}}(x) \rightarrow -\sigma_{\vec{r}}(x)$ entspricht eine Reflexion $R(\vec{r})$ des Feldes $\vec{\Phi}(x)$ an der Hyperebene senkrecht zu $\vec{r}$:

$$\vec{\Phi}(x) = \vec{\Phi}_{\perp}(x) + \sigma_{\vec{r}}(x) |\vec{\Phi}_{\parallel}(x)| \vec{r} \rightarrow R(\vec{r}) \vec{\Phi}(x) = \vec{\Phi}_{\perp}(x) - \sigma_{\vec{r}}(x) |\vec{\Phi}_{\parallel}(x)| \vec{r}. \quad (4.12)$$

Für festgehaltene Werte $\{\vec{\Phi}_{\perp}\}$ und $\{\vec{\Phi}_{\parallel}\}$ reduziert sich die Gitterwirkung auf ein ferromagnetisches Ising-Modell definiert durch

$$S_{\text{Ising}}\{\sigma\} = - \sum_{\langle xy \rangle} \kappa_{xy} |\vec{\Phi}(x) \cdot \vec{r}| |\vec{\Phi}(y) \cdot \vec{r}| \sigma_{\vec{r}}(x) \sigma_{\vec{r}}(y) + \text{const.} \quad (4.13)$$

mit einer Zufalls-Kopplung $J_{xy} = \kappa_{xy} |\vec{\Phi}(x) \cdot \vec{r}| |\vec{\Phi}(y) \cdot \vec{r}|$. Die Terme, die nicht von $\sigma(x)$ abhängen, stecken in der Konstanten.

Werden die Kopplungen J_{xy} auf einem Gitter mit gerader Anzahl Nachbarn entlang geschlossener Kurven multipliziert, so ist das Ergebnis immer positiv oder Null, und somit erwartet man keine Frustrationseffekte. In [44] wird gezeigt, daß – unabhängig von Schritt 2 – die Einbettungsabbildung R eine Isometrie (abstandserhaltend) sein muß und ihre Fixpunktmenge (hier die Fläche, auf der der Reflexionsvektor $\vec{r}$ senkrecht steht) die Kodimension 1 haben muß, wenn ein kritischer Exponent $z \ll 2$ angestrebt wird.

4.2.2 Aufdatierung

Das Zustandsintegral für ein ferromagnetisches Ising-Modell mit einer Wirkung von der Art (4.13) läßt sich folgendermaßen umformen:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left(\sum_{\langle xy \rangle} J_{xy} (\sigma(x) \sigma(y) - 1) \right) \quad (4.14)$$

$$= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle xy \rangle} \left[(1 - p_{xy}) + p_{xy} \delta(\sigma(x) \sigma(y) - 1) \right], \quad (4.15)$$

wobei $p_{xy} = 1 - \exp(-2J_{xy})$ und $\delta(\sigma(x) \sigma(y) + 1) = 1 - \delta(\sigma(x) \sigma(y) - 1)$ ist⁴.

Mit Hilfe der Identität $p_0 + p_1 = \sum_{b=0}^1 (p_0 \delta_{b,0} + p_1 \delta_{b,1})$ werden an jeder „Gitterkante“ $\langle xy \rangle$ Hilfsvariable b_{xy} eingeführt, die die Werte 0 und 1 annehmen können. Das Zustandsintegral wird eine Summe über die Felder auf den Gitterplätzen und die Hilfsvariablen b_{xy} auf den Gitterkanten:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{\langle xy \rangle} \left[(1 - p_{xy}) \delta_{b_{xy},0} + p_{xy} \delta_{b_{xy},1} \delta(\sigma(x) \sigma(y) - 1) \right]. \quad (4.16)$$

Die Größen b_{xy} können als dynamische Variable angesehen werden, die den Besetzungszustand einer Gitterkante indizieren: 1 = Bindung besetzt, 0 = leer.

⁴Mit dieser Eigenschaft macht man sich zunutze, daß die unten eingeführte Bindungsvariable b_{xy} nur zwei Werte 0, 1 annehmen kann. Eine Clustering von Elementarzellen der Dimension 0 (Gitterplätzen) durch Elementarzellen der Dimension 1 (Gitterkanten) wäre bei einer größeren Zahl von Bindungseigenschaften schwieriger. Die Frustrationseigenschaften müßten neu überdacht werden.

Wird die Summation über die Feldkonfigurationen $\{\sigma\}$ bei festgehaltenem Besetzungszustand $\{b\}$ der Gitterkanten ausgeführt, so müssen die Spins $\sigma(x)$ und $\sigma(y)$ an den Enden einer besetzten Gitterkante im gleichen Zustand sein. Unbesetzte Gitterkanten schränken die Spins nicht ein. Alle Gitterplätze, die durch besetzte Gitterkanten (*bonds*) verbunden sind, werden zu Clustern zusammengesetzt, deren Spins sich alle in denselbem Zustand befinden. Ist N_c die Anzahl zusammenhängender Cluster, so erhält man das Zustandsintegral in der Fortuin–Kasteleyn–Darstellung [49]:

$$Z = \sum_{\{b\}} \left(\prod_{\langle xy \rangle, b_{xy}=1} p_{xy} \right) \left(\prod_{\langle xy \rangle, b_{xy}=0} (1 - p_{xy}) \right) 2^{N_c}. \quad (4.17)$$

Der Swendsen–Wang Clusteralgorithmus [60] besteht, auf der Grundlage von Gleichung (4.16), aus der alternierenden Erzeugung neuer Konfiguration von Bindungsvariablen für eine gegebene Spinverteilung und der Zuweisung neuer Spinvariablen bei vorgegebenen Bindungen:

- Für gegebene Spinkonfiguration $\{\sigma\}$ ist die Lesart von Gl. (4.16) also folgende: Setze unabhängig auf jeder Gitterkante $\langle xy \rangle$ eine Bindung $b_{xy} = 1$ mit der Wahrscheinlichkeit p_{xy} , wenn $\sigma(x), \sigma(y)$ im gleichen Zustand sind. Ansonsten bleibe die Gitterkante ungesetzt, $b_{xy} = 0$.
- Umgekehrt bedeutet dies für eine gegebene Cluster-Konfiguration $\{b\}$, daß unabhängig alle Spins $\sigma(x)$ eines Clusters C auf einen gleichen (neuen) Wert zu setzen sind.

Der Clusteralgorithmus ist ergodisch und erfüllt die Gleichgewichtsbedingung (4.6). Ausführlicher wird dies in Verbindung mit der Verallgemeinerung für eine endliche äußere Quelle in Anhang A diskutiert.

Mit Hilfe des Zustandsintegrals (4.16) lassen sich auch die Observablen der Spinfelder $Q(\sigma)$ in die Cluster-Darstellung $Q(b)$ transformieren, die den Vorteil besitzt, daß nur die Spins innerhalb eines Clusters miteinander korreliert sind. Ihre Schätzwerte besitzen insbesondere dann eine reduzierte Varianz, wenn bei der Berechnung (wie z.B. für die 2-Punkt-Funktion) ausschließlich über positive Beiträge gemittelt wird [45, 64].

4.2.3 Iterationsschritte des Algorithmus

Eine Iteration des Algorithmus wird in folgenden Schritten realisiert:

Einbettungsschritt:

Zunächst wählt man zufällig eine Richtung $\vec{r} \in S^{N-1}$ im Raum der inneren $O(N)$ -Symmetrie. Die Einbettungsvariable ist hierbei die Reflexion $R^C(\vec{r})$ der Feldvariablen des Clusters C an der Hyperebene orthogonal zu $\vec{r}$.

Setzen der Bindungen (*bonds*):

Zwei Punkte x, y werden mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\vec{r}}(\vec{\Phi}, < xy >) = \max \left\{ 0, 1 - \exp \left(-4\kappa_{x,y} \left(\vec{r} \cdot \vec{\Phi}(x) \right) \left(\vec{r} \cdot \vec{\Phi}(y) \right) \right) \right\}. \quad (4.18)$$

durch eine Bindung (engl. *bond*) $\ell = < xy >$ verknüpft. Dabei sind für zwei Gitterplätze x, y , die nächste oder übernächste Nachbarn sind, die Kopplungen $\kappa_{x,x+\hat{\mu}} = \kappa$ bzw. $\kappa_{x,x+2\hat{\mu}} = \kappa\omega$.

Aufinden der Multi-Cluster-Struktur:

Die aktivierten Bindungen (*bonds*) definieren eindeutig eine Multi-Cluster-Struktur $\{c_i\}$ des Gitters, die aus N_C Clustern besteht. Dadurch wird automatisch auch eine Oberflächenstruktur $\{\partial c_i\}$ zwischen den Clustern definiert. Um schließlich die entsprechenden Cluster c_i aufzufinden, ist ein möglichst schneller Suchalgorithmus notwendig (s.u.).

Auswahl des Multi-Clusters:

Für den verallgemeinerten Fall mit äußerer Quelle J werden Einzel-Cluster c_j mit der von der Feldkonfiguration abhängigen Wahrscheinlichkeit

$$w(\vec{\Phi}, c_j) = \left(1 + \exp \left(2Jr_N \sum_{x \in c_j} \left(\vec{r} \cdot \vec{\Phi}(x) \right) \right) \right)^{-1}. \quad (4.19)$$

in den Multi-Cluster C aufgenommen. Dies ist ein Resultat der Betrachtungen zum detaillierten Gleichgewicht in Anhang A. Im Grenzfall $J = 0$ ist $w(\vec{\Phi}, c_j) = \frac{1}{2}$, d.h. jeder zweite Cluster wird reflektiert bzw. nicht reflektiert.

Die beiden letztgenannten Schritte entfallen in der 1-Cluster-Methode nach U. Wolff [62], in der ausgehend von einem zufällig gewählten Gitterpunkt ein Cluster durch das Setzen der Bindungen (*bonds*) mit der Wahrscheinlichkeit (4.18) „wächst“.

Aufdatierung (*update*):

Die Felder im Multi-Cluster C werden an der Hyperebene senkrecht zu $\vec{r}$ reflektiert:

$$R^C(r) \vec{\Phi}(x) := \begin{cases} \vec{\Phi}(x) - 2(\vec{\Phi} \cdot \vec{r})\vec{r} & \text{für } x \in C \\ \vec{\Phi}(x) & \text{für } x \notin C \end{cases}. \quad (4.20)$$

Dies entspricht einem Vorzeichenwechsel der eingebetteten Ising-Variable: $\sigma_{\vec{r}}(x) \rightarrow -\sigma_{\vec{r}}(x)$ für $x \in C$.

4.2.4 Suchalgorithmen

Um die entsprechenden Cluster aufzufinden, wurden zwei Standard-Algorithmen verwendet, die auf den beiden Vektor-Großrechnern, CRAY-Y-MP8/832 und Fujitsu-Siemens-Nixdorf SNI 600/20 mit unterschiedlichem Erfolg verwendet werden können.

Ein Baum-artiger Suchalgorithmus:

Sehr schnell (vektorisierbar) werden zunächst alle Cluster gefunden, die aus einem bzw. zwei Punkten bestehen. Ausgehend vom Ursprung des Gitters durchwandert man (skalar) alle Punkte des Gitters, die noch zu keinem Cluster gehören. Von diesen Startpunkten aus durchsucht man das Gitter in alle $2d$ Richtungen nach verbundenen Punkten im Abstand 1 und von den im Abstand 1 verbundenen Punkten aus immer weiter, bis man keine neuen verbundenen Punkte mehr findet. Als sehr schnell (zumindest auf der CRAY) hat sich die Vektorisierung über die „Oberfläche“ der zuletzt gefundenen Punkte des Verzweigungsbaumes erwiesen, die H.G. Evertz vorgeschlagen hat [46].

Ein Suchalgorithmus mit Zeigern:

Zunächst wird jeder Gitterpunkt durchnummeriert und dieser Index wird ihm als Clusternummer zugeteilt. Ausgehend vom Ursprung des Gitters werden nun alle Punkte des Gitters durchlaufen und alle d positiven Richtungen untersucht. Der Trick besteht darin, Punkten, die über einen Baum verbunden sind, den niedrigsten Index aus der Menge aller bisher gefundenen Punkte dieses Baumes zuzuordnen (sprich: einen Zeiger auf den Punkt des Baumes mit dem minimalen Index zu setzen) [52]. Hinterher werden die so gefundenen Clusternummern – aus buchhalterischen Gründen – neu durchnummeriert. Eine effektive Vektorisierung scheitert in diesem Fall an den periodischen Randbedingungen des Gitters, sie ist allerdings wie auch eine Parallelisierung im Prinzip möglich [57]. Dieser überwiegend skalare, auf dem SNI 600/20-Rechner aber dennoch schnellste Algorithmus, kann dort nochmals um 20 % beschleunigt werden, indem wie im ersten Fall zunächst alle 1- und 2-Punkt-Cluster vektorisiert gesucht werden.

4.3 Verteilungen und Histogramm-Methode

Durch Simulation des Modells bei bestimmten Werten der Kopplungsparameter κ und J können aus geeigneten Verteilungen Ergebnisse bei benachbarten Werten der Parameter erhalten werden [47]. Zunächst werden die der Histogramm-Methode zugrundeliegenden *exakten* Integrale angegeben, um eine für ein Parameterpaar ($J = 0, \kappa_0$) gemessene Doppel-Verteilung der Magnetisierung und der Energie zu anderen Parameterwerten (J, κ) analytisch fortzusetzen. Anschließend werden die Ausdrücke den numerischen Gegebenheiten angepaßt – sprich diskretisiert.

4.3.1 Doppel-Verteilung von Magnetisierung und Energie

Für die Extrapolation in der äußeren Quelle J wird die Verteilung der Magnetisierung, des Mittelwertes des Feldes über das Gittervolumen

$$\frac{1}{V} \sum_x \vec{\Phi}(x), \quad (4.21)$$

benötigt und für die Extrapolation in κ wird die Verteilung der kinetischen Energie gemessen:

$$\frac{1}{V} \sum_x \mathcal{O}(x) = \frac{1}{V} \sum_{x,\mu} \left[\left(\vec{\Phi}(x) \cdot \vec{\Phi}(x + \hat{\mu}) + \vec{\Phi}(x) \cdot \vec{\Phi}(x - \hat{\mu}) \right) \right. \\ \left. + \omega \left(\vec{\Phi}(x) \cdot \vec{\Phi}(x + 2\hat{\mu}) + \vec{\Phi}(x) \cdot \vec{\Phi}(x - 2\hat{\mu}) \right) \right]. \quad (4.22)$$

Da wir hauptsächlich an kleinen Werten von J interessiert sind, haben wir das Modell bei verschwindender äußerer Quelle sowie einigen Werten von $\kappa = \kappa_0$ simuliert und die Doppel-Verteilung der Magnetisierung und der Energie gemessen:

$$\tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E) = \int \mathcal{D}\vec{\Phi} \exp \left(-S\{\vec{\Phi}; J=0, \kappa_0, \omega\} \right) \\ \times \delta \left(E - \frac{1}{V} \sum_x \mathcal{O}(x) \right) \delta \left(\vec{M} - \frac{1}{V} \sum_x \vec{\Phi}(x) \right). \quad (4.23)$$

Aufgrund der $O(N)$ -Symmetrie bei $J=0$ hängt sie nur von dem Absolutwert $M = |\vec{M}|$ der Magnetisierung und der Energie E ab.

Die Verteilung der Magnetisierung bei benachbarten $\kappa \neq \kappa_0$ wird aus der Doppel-Verteilung mit Hilfe des „gewöhnlichen“ Integrals

$$\tilde{Z}_{\kappa}(M) = \int_0^{\infty} dE \exp \left(V(\kappa - \kappa_0)E \right) \tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E) \quad (4.24)$$

berechnet⁵. – Wird die Symmetrie explizit durch eine äußere Quelle J gebrochen, kann das Zustandsintegral $Z(J, \kappa)$ als gewöhnliches Integral über die Magnetisierung $\vec{M}$ und die Energie E geschrieben werden:

$$Z(J, \kappa) = \int \mathcal{D}\vec{\Phi} \exp \left(-S\{\vec{\Phi}; J, \kappa, \omega\} \right) \\ = \int d^N M \int_0^{\infty} dE \exp \left(V J M_N \right) \exp \left(V(\kappa - \kappa_0)E \right) \tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E) \quad (4.25) \\ = \int d^N M \exp \left(V J M_N \right) \tilde{Z}_{\kappa}(M).$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird J in Richtung von M_N gelegt und die explizite ω -Abhängigkeit in $Z(J, \kappa)$ unterdrückt. Die Winkelintegration kann ausgeführt werden. Ist man jedoch ebenfalls an der Verteilung der Komponente M_N interessiert, die an die äußere Quelle J koppelt, so führt man zunächst nur $N-2$ Integrationen aus. Mit

$$h(M, M_N) := \Theta(M - |M_N|) M^{N-2} \left(1 - \left(\frac{M_N}{M} \right)^2 \right)^{(N-3)/2} \frac{2\pi^{\frac{N-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)} \quad (4.26)$$

⁵Die Verteilung (4.24) steht in enger Beziehung zu dem „eingeschränkten“ effektiven Potential $\exp(-V\mathcal{U}(\sqrt{2\kappa}M)) \sim \tilde{Z}_{\kappa}(M)$, das in Kapitel 5 eingeführt wird.

erhält man für das Zustandsintegral

$$Z(J, \kappa) = \int_0^\infty dM \int_{-\infty}^\infty dM_N \int_0^\infty dE h(M, M_N) \exp(VJM_N) \exp(V(\kappa - \kappa_0)E) \tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E). \quad (4.27)$$

Wird die Winkelintegration vollständig ausgeführt, so kann das Zustandsintegral $Z(J, \kappa)$ als ein gewöhnliches 2dimensionales Integral über die Doppel-Verteilung $\tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E)$ geschrieben werden:

$$Z(J, \kappa) = 2\pi^{\frac{N}{2}} \int_0^\infty dM M^{N-1} Y_N(VJM) \int_0^\infty dE \exp(V(\kappa - \kappa_0)E) \tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E), \quad (4.28)$$

mit

$$Y_N(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{-\nu} I_\nu(x) = \sum_{k=0}^\infty \frac{1}{k!} \frac{1}{\Gamma(\nu + k + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k}, \quad \nu = \frac{N}{2} - 1. \quad (4.29)$$

Die Funktionen $I_\nu(x)$ sind modifizierte Besselfunktionen.

Bedeutung der Funktion $h(M, M_N)$ (Gl. (4.26))

Seien jeweils $\bar{P}_\kappa(M)$ und $P_\kappa(M_\alpha)$ die auf eins normierten Verteilungen des Betrages der Magnetisierung bzw. der Projektion der Magnetisierung auf eine (beliebige) Richtung α bei $J=0$. Dann gilt mit den obigen Definitionen folgende Gleichungskette:

$$\begin{aligned} 1 = \int_0^\infty dM \bar{P}_\kappa(M) &= \int d^N M \frac{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}{2\pi^{\frac{N}{2}}} \frac{\bar{P}_\kappa(M)}{M^{N-1}} \\ &= \int_0^\infty dM \int_{-\infty}^\infty dM_\alpha h(M, M_\alpha) \frac{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}{2\pi^{\frac{N}{2}}} \frac{\bar{P}_\kappa(M)}{M^{N-1}} \\ &= \int_{-\infty}^\infty dM_\alpha P_\kappa(M_\alpha) = 1. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Das bedeutet, für eine gegebene normierte Verteilung der Länge der Magnetisierung $\bar{P}_\kappa(M)$ ist die entsprechende Verteilung $P_\kappa(M_\alpha)$ einer Komponente M_α durch das einfache Integral

$$P_\kappa(M_\alpha) = \int_0^\infty \frac{dM}{M} \Theta(M - |M_\alpha|) \left(1 - \left(\frac{M_\alpha}{M}\right)^2\right)^{(N-3)/2} \frac{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)} \bar{P}_\kappa(M) \quad (4.31)$$

gegeben. Die Bedeutung der Funktion $h(M, M_N)$ wird anschaulich, wenn wir eine Deltaverteilung $\bar{P}_\kappa(M) \sim \delta(\bar{M} - M)$ des Absolutwertes M der Magnetisierung voraussetzen: Für $J=0$ ist die Verteilung $P_\kappa(M_\alpha)$ einer Komponente M_α dann proportional zu $h(\bar{M}, M_\alpha)$.

Die Eigenschaft (4.31) kann mit Hilfe der Gleichungen (4.27) und (4.28) für endliches J verallgemeinert werden: Sind die Wahrscheinlichkeiten des Absolutwertes der Magnetisierung M , der Komponente M_N parallel zur äußeren Quelle und der Energie E , in den Intervallen dM , dM_N bzw. dE enthalten zu sein, in folgender Weise normiert:

$$\int_0^\infty dM \bar{P}_{J,\kappa}(M) = 1, \quad \int_{-\infty}^\infty dM_N P_{J,\kappa}(M_N) = 1, \quad \int_0^\infty dE \tilde{P}_{J,\kappa}(E) = 1, \quad (4.32)$$

so können sie durch gewöhnliche Integrale über die Doppelverteilung $\tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E)$ ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \bar{P}_{J,\kappa}(M) &= 2\pi^{\frac{N}{2}} M^{N-1} Y_N(VJM) \frac{\bar{Z}_\kappa(M)}{Z(J, \kappa)}, \\ P_{J,\kappa}(M_N) &= \left(\int_0^\infty dM \tilde{Z}_\kappa(M) h(M, M_N) \right) \frac{\exp(VJM_N)}{Z(J, \kappa)}, \\ \tilde{P}_{J,\kappa}(E) &= 2\pi^{\frac{N}{2}} \left(\int_0^\infty dM M^{N-1} Y_N(VJM) \tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E) \right) \frac{\exp(V(\kappa - \kappa_0)E)}{Z(J, \kappa)}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Schließlich können die Erwartungswerte, an denen wir interessiert sind, in sehr kompakter Form geschrieben werden. So erhalten wir z.B. für den Erwartungswert der Komponente der Magnetisierung, die in Richtung der äußeren Quelle weist:

$$\left\langle \frac{1}{V} \sum_x \Phi^N(x) \right\rangle_{J,V,\kappa} = \langle M_N \rangle_{J,V,\kappa} = \int_{-\infty}^\infty dM_N P_{J,\kappa}(M_N) M_N \quad (4.34)$$

und für den Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung

$$\left\langle \left| \frac{1}{V} \sum_x \vec{\Phi}(x) \right| \right\rangle_{J,V,\kappa} = \langle M \rangle_{J,V,\kappa} = \int_0^\infty dM \bar{P}_{J,\kappa}(M) M. \quad (4.35)$$

Falls also die Doppel-Verteilung von E und M bei einem Simulationspunkt $J = 0$, $\kappa = \kappa_0$ mit unendlicher Genauigkeit bekannt wäre, könnten die Zustandssumme $Z(J, \kappa)$, die Verteilungen $\bar{P}_{J,\kappa}(M)$, $P_{J,\kappa}(M_N)$ und $\tilde{P}_{J,\kappa}(E)$ sowie die Erwartungswerte $\langle M \rangle_{J,V,\kappa}$ und $\langle M_N \rangle_{J,V,\kappa}$ bei jedem beliebigen Wertepaar (J, κ) berechnet werden.

4.3.2 Histogramm-Methode

Da die Statistik von numerischen Simulationen natürlich beschränkt ist, wird eine diskretisierte Form der Doppel-Verteilung $\tilde{Z}_{\kappa_0}(M, E)$, ein sogenanntes Doppel-Histogramm $\tilde{N}_{\kappa_0}(M, E)$, mit einer Genauigkeit von n^2 Häufigkeits-Klassen (engl. *bins*) gemessen. Aus diesem Grund kann nur zu Wertepaaren (J, κ) innerhalb einer Umgebung eines Simulationspunktes ($J = 0, \kappa = \kappa_0$) fortgesetzt werden. Das Verfahren, mit Hilfe der diskretisierten Form des Integrals (4.28) zu benachbarten Werten der Simulationsparameter fortzusetzen, wird **Histogramm-Methode** genannt [47].

Wird zwischen mehreren benachbarten Simulationsparametern $\kappa_1, \dots, \kappa_n$ – mit einer geeigneten Gewichtung der einzelnen Histogramme $\tilde{N}_{\kappa_i}(M, E)$ – interpoliert, so spricht man von der **Multi-Histogramm-Methode** [48]. Die einzelnen Histogramme $\tilde{N}_{\kappa_i}(M, E)$ tragen mit einem Gewicht $\exp(V(\kappa - \kappa_i)E)$ zu dem interpolierten Histogramm $\tilde{N}_{\kappa}(M, E)$ bei⁶. Für unsere Wahl der Parameter κ_i hat sich in den numerischen Untersuchungen allerdings nur ein geringer Überlapp zwischen den einzelnen Histogrammen ergeben (s. Abb. 4.1), so daß die **Ein-Histogramm-Methode** praktikabler ist. Für den äußeren Strom ist in den Simulationen nur der Wert $J=0$ gewählt worden, so daß wir bezüglich J von vornherein auf die **Ein-Histogramm-Methode** festgelegt sind.

Programmtechnisch wird dabei so vorgegangen, daß in ausreichend vielen Testkonfigurationen die Bereichsgrenzen

$$\begin{aligned} M_{\min} &= \min \left\{ \frac{1}{V} \sum_x \vec{\Phi}(x) \right\}, & M_{\max} &= \max \left\{ \frac{1}{V} \sum_x \vec{\Phi}(x) \right\}, \\ E_{\min} &= \min \left\{ \frac{1}{V} \sum_x \mathcal{O}(x) \right\} & E_{\max} &= \max \left\{ \frac{1}{V} \sum_x \mathcal{O}(x) \right\} \end{aligned} \quad (4.36)$$

gemessen werden⁷. Innerhalb dieser Wertebereiche werden n Intervalle

$$\begin{aligned} & \left[M_{\min} + (i-1)\Delta M, M_{\min} + i\Delta M \right] \\ & \left[E_{\min} + (j-1)\Delta E, E_{\min} + j\Delta E \right] \end{aligned} \quad (i, j = 1, \dots, n) \quad (4.37)$$

der Breiten $\Delta M = (M_{\max} - M_{\min})/n$ und $\Delta E = (E_{\max} - E_{\min})/n$ für die Magnetisierung bzw. für die Energie E abgesteckt. In unseren Simulationen ist $n = 400$ gewählt worden.

Die Datenpaare (M, E) aller Simulationen werden in einem Doppelhistogramm $\tilde{N}_{\kappa_i}(M, E)$ gespeichert, die Daten in Blöcke unterteilt und die Histogramme blockweise normiert. Mit Hilfe der Beziehungen (4.33) werden die Verteilungen $\bar{P}_{J,\kappa}(M)$, $P_{J,\kappa}(M_N)$ und $\bar{P}_{J,\kappa}(E)$ entweder für kleine Werte von J oder für benachbarte κ -Werte berechnet. Die Integrale

$$\int_0^\infty dM \rightarrow \sum_{i=1}^n \Delta M, \quad \int_0^\infty dE \rightarrow \sum_{j=1}^n \Delta E \quad (4.38)$$

sind dann als endliche Summen zu lesen.

In ausreichend großen Gittervolumina wird eine relativ spitze Verteilung $\bar{P}_{J,\kappa}(M)$ der Länge der Magnetisierung um den Mittelwert erwartet, ΔM ist entsprechend klein. Würde auch die Verteilung der Komponente M_N direkt gemessen, wäre die Statistik zu gering, um eine „glatte“, über das ganze Intervall $[-M_{\max}, +M_{\max}]$ streuende Verteilung zu liefern. Mit Hilfe der diskretisierten Formeln von (4.31) bzw.

⁶Die genaueren Einzelheiten zur Berechnung der Gewichtung der einzelnen Histogramme werden in [47, 48] diskutiert.

⁷In der Regel werden diese Intervalle, um Bereichsüberschreitungen zu vermeiden, noch um einen Faktor 2 vergrößert.

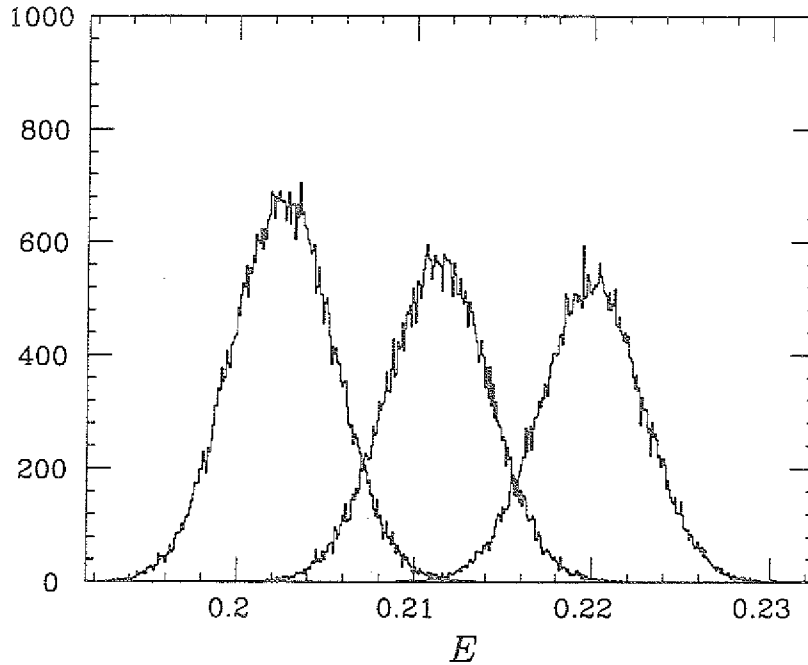


Abbildung 4.1: Unnormierte Verteilungen der kinetischen Energie $\sim \tilde{P}_{J=0, \kappa_0}(E)$ für $L=16$ im Fall der Standard-Wirkung bei $\kappa_0=0.306, 0.308, 0.310$.

(4.33) gewinnt man allerdings aus der Verteilung des Betrages der Magnetisierung eine sehr „glatte“ Verteilung einer beliebigen Komponente (bei $J=0$) bzw. der Komponente parallel zur äußeren Quelle. Dieser Zusammenhang wird in Abbildung 4.2 veranschaulicht.

Eine äquivalente, numerische Möglichkeit, diese Verteilung zu „glätten“, die nicht auf die Kenntnis der Funktion $h(M, M_N)$ zurückgreift, besteht darin, in jedem Konfigurationsschritt die Magnetisierung vor der Projektion auf die N -Richtung beliebig oft (i.a. reichen ca. 100 Mal) einer zufälligen $O(N)$ -Rotation zu unterwerfen⁸.

4.4 Numerische Ergebnisse zu den Verteilungen

Die Monte-Carlo-Simulationen zum ersten Teil der Arbeit sind auf hyperkubischen Gittern mit Volumen $V=L^4$ durchgeführt worden. Die Gitterausdehnungen reichen von $L=12$ in 2er-Schritten bis $L=20$. Im zweiten Teil der Arbeit (beginnend bei Seite 115) ist auf zylindrischen Gittern mit $V=L^3 \cdot T$ gerechnet worden, deren Volumen noch um gut einen Faktor 8 größer sind. Die numerische Ergebnisse zum zweiten Teil werden in den Kapiteln 9 und 10 diskutiert.

⁸Diese Idee geht auf Thomas Neuhaus zurück.

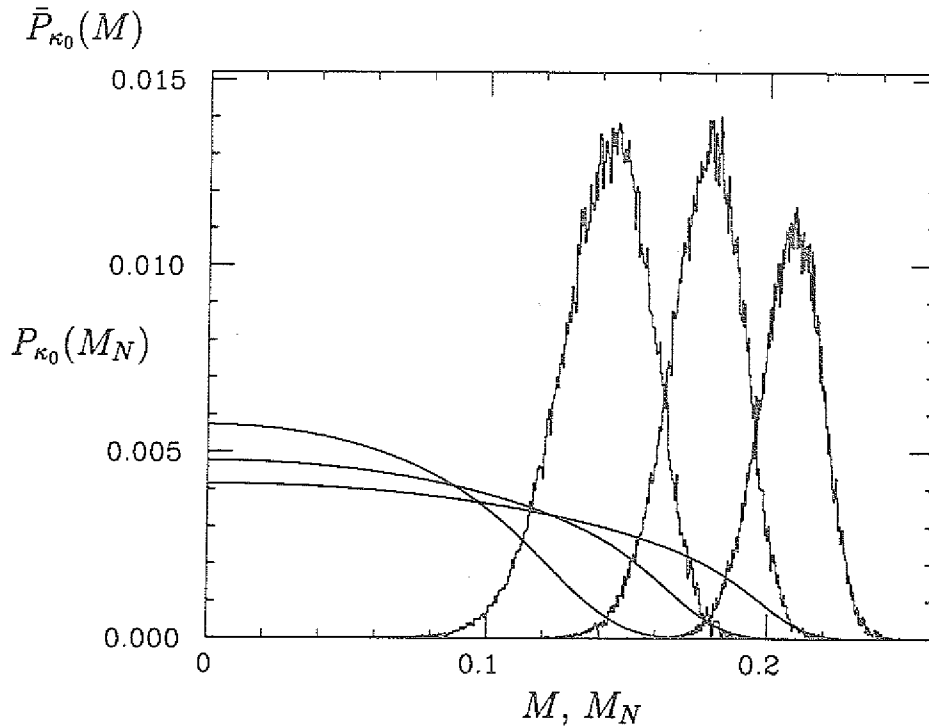


Abbildung 4.2: Die normierten Verteilungen $\bar{P}_{\kappa_0}(M)$ (gezackte Kurven) und $\bar{P}_{\kappa_0}(M_N)$ (glatte Kurven) der Länge der Magnetisierung M bzw. der Projektion M_N für $L=16$ im Fall der Standard-Wirkung bei $\kappa_0=0.306, 0.308, 0.310$ und $J=0$.

Für jede Gittergröße und jeden κ -Wert sind ca. 20 000 – 180 000 Messungen durchgeführt worden, wobei zwischen zwei aufeinanderfolgenden Messungen 4 Multi-Cluster-Konfigurationen (s. Abschn. 4.2) generiert werden. Die statistischen Fehler werden durch Zusammenfassen der Daten in Blöcke mit 5 000 – 6 000 Datenpunkten bestimmt, indem die Mittelwerte und Verteilungen in jedem Block als unabhängige Messung behandelt werden.

Die Doppel-Histogramme $\tilde{N}_{\kappa_0}(M, E)$ der Magnetisierung und der kinetischen Energie werden für eine bestimmte Menge von κ_0 -Werten bei $J=0$ gemessen. Für die Standard-Wirkung ist $\kappa_0 \in \{0.306, 0.308, 0.310\}$ gewählt worden und für die verbesserte Wirkung $\kappa_0 \in \{0.338, 0.340, 0.345, 0.350\}$. Ausgehend von diesen κ_0 -Werten werden die Ergebnisse sowohl zu benachbarten κ -Werten als auch zu nichtverschwindenden äußeren Quellen J fortgesetzt, wie dies im Abschnitt 4.3 beschrieben worden ist (sogenannte Ein-Histogramm-Methode). Abbildung 4.1 zeigt solche charakteristischen Verteilungen für die Standard-Wirkung bei $L=16$. Die einzelnen Verteilungen für die unterschiedlichen κ_0 -Werte überlappen kaum. So ist verständlich, daß die Multi-Histogramm-Methode keine signifikanten Verbesserungen liefert.

Abbildung 4.2 bestätigt die im Limes $V \rightarrow \infty$ erwartete spitze Verteilung $\bar{P}_{\kappa}(M) \rightarrow \delta(\bar{M} - M)$ der Länge der Magnetisierung um den Mittelwert $\bar{M}$, während die Verteilung einer Komponente M_{α} (die Projektion der Länge auf die Richtung α) eine

breite Verteilung um die Null

$$P_{\kappa}(M_{\alpha}) \rightarrow \Theta(\bar{M} - |M_{\alpha}|) \frac{2}{\pi \bar{M}} \sqrt{1 - \left(\frac{M_{\alpha}}{\bar{M}}\right)^2} \quad (4.39)$$

beschreibt.

In Abbildung 4.3 werden alle analytisch fortgesetzten Daten für die Magnetisierung $\langle M \rangle_{\kappa, V}$ und die Suszeptibilität $\chi = (1/V) \left(\langle M^2 \rangle_{\kappa, V} - \left(\langle M \rangle_{\kappa, V} \right)^2 \right)$ dargestellt. Aus der Volumenabhängigkeit dieser Größen für einen festen κ -Wert werden in Kapitel 5 der Felderwartungswert Σ und die Masse m_{σ} des σ -Teilchens im unendlichen Volumen berechnet⁹.

Dieses Vorgehen, erst aus der Volumenabhängigkeit die Größen im unendlichen Volumen zu bestimmen und anschließend das Skalenverhalten der im unendlichen Volumen definierten Größen zu untersuchen, ist nicht zu verwechseln mit dem sogenannten *Finite-Size-Scaling-Limes*. Dort wird der thermodynamische Limes $L \rightarrow \infty$ ausgeführt, aber die Parameter in der Wirkung (bzw. Hamiltonfunktion) sind so einzustellen, daß das Verhältnis von Gitterausdehnung und Korrelationslänge L/ξ festgehalten wird.

⁹Dort haben wir uns allerdings für die Daten aus der Ein-Histogramm-Methode entschieden.

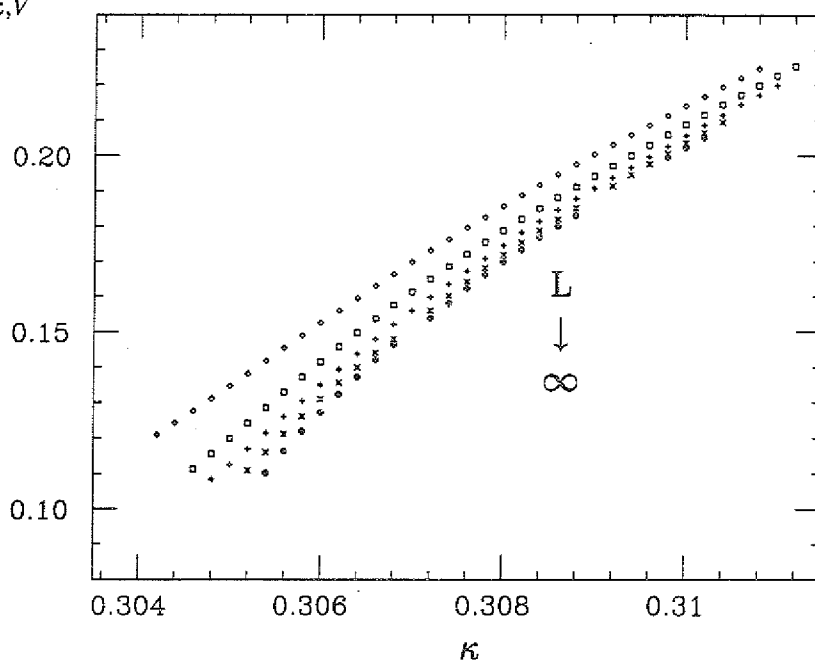
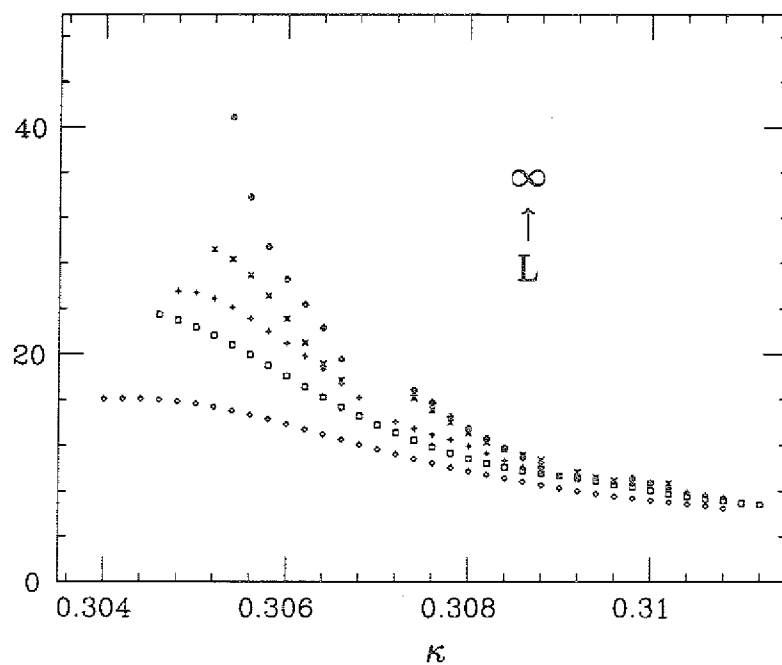
$\langle M \rangle_{\kappa,V}$  χ 

Abbildung 4.3: Dargestellt sind (für die Standard-Wirkung) die Magnetisierung $\langle M \rangle_{\kappa,V}$ und die Suszeptibilität $\chi = (1/V) \left(\langle M^2 \rangle_{\kappa,V} - (\langle M \rangle_{\kappa,V})^2 \right)$ für alle untersuchten Gittervolumina als Funktionen von κ , wie sie aus der Multihistogramm-Methode erhalten werden. Die Fehler der Datenpunkte werden aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht mit dargestellt. Die Werte der Magnetisierung nehmen mit steigendem Volumen ab, während umgekehrt die Suszeptibilität in diesem Fall zunimmt.

Kapitel 5

Berücksichtigung der Effekte des endlichen (Gitter)–Volumens

In diesem Kapitel werden die Beziehungen abgeleitet, mit Hilfe derer später der Felderwartungswert Σ , die Wellenfunktions–Renormierungskonstante Z , und die Masse m_σ des σ –Teilchens – Größen die im unendlichen Volumen definiert sind – aus den numerischen Daten bei endlichem Volumen $V = L^d$ gewonnen werden.

Zunächst sei der Ursprung von Volumenabhängigkeiten am Beispiel der Masse eines stabilen Teilchens anschaulich illustriert: Ein punktförmiges stabiles Teilchen polarisiert das umgebende Vakuum, ist also in einer Wolke virtueller Teilchen gehüllt, deren Durchmesser ungefähr der Compton–Wellenlänge des leichtesten Teilchens im Spektrum entspricht. Diese Wolke virtueller Teilchen trägt zur Selbstenergie des Teilchens bei. Wird das Teilchen in einen endlichen räumlichen Torus eingeschlossen, so ändert sich seine Selbstenergie, sobald die Compton–Wellenlänge des leichtesten Teilchens die Ausdehnung L des Torus erreicht. M. Lüscher hat diese Energieverschiebung zunächst störungstheoretisch untersucht [101]: Die Feynman Regeln für ein endliches Volumen mit periodischen Randbedingungen sind zwar analog zu denen im unendlichen Volumen, allerdings treten zusätzlich Feynman–Diagramme auf, bei denen virtuelle Teilchen „um die Welt reisen“. In *massiven* Quantenfeldtheorien sind diese Effekte exponentiell mit $\sim \exp(-mL)$ unterdrückt.

Die spontane Symmetriebrechung einer kontinuierlichen Symmetrie geht, volle Lorentz–Kovarianz vorausgesetzt, mit der Existenz *masseloser* Teilchen (Goldstone–Bosonen [10]) einher. *Spontane* Symmetriebrechung tritt allerdings nur im thermodynamischen Limes auf. Ein Verfahren, mit Hilfe dessen dennoch das symmetriebrechende Verhalten im endlichen Volumen studiert werden kann und das Divergenzen des Goldstone–Propagators im infraroten Bereich unterbindet, beruht auf der Einführung eines explizit symmetriebrechenden Termes $j \sum_x \phi^N(x)$, der das Feld an eine äußere Quelle j ankoppelt und somit den Goldstone–Bosonen eine endliche Masse $m_\pi \sim \sqrt{j}$ zuweist. Die Quelle j kann zu Null geschickt werden, nachdem der thermodynamische Limes durchgeführt worden ist. Bei kleinen Werten der äußeren Quelle bleiben diese Goldstone–Moden leicht. Die damit in Verbindung stehenden Volumeneffekte sind nicht exponentiell mit $\exp(-m_\pi L)$ unterdrückt, können aber mit Hilfe der chiralen Störungstheorie erklärt werden.

Im Gegensatz zu bisherigen Erfahrungen [78, 76], kann die chirale Störungstheorie (s. Abschn. 5.2) jedoch nahe am Phasenübergang, d.h. für kleine Werte der σ -Masse, nicht erfolgreich angewendet werden. Für die Gittergrößen, die mit heutigen Computerressourcen realisierbar sind, ist dann das Produkt $m_\sigma L$ zu klein, um die Volumeneffekte aufgrund der σ -Masse zu unterdrücken, so daß eine Hauptbedingung für die Anwendbarkeit der chiralen Störungstheorie nicht erfüllt ist.

In einer zweiten Methode, die Divergenzen im infraroten Bereich (Impuls-Null-Moden) in den Griff zu bekommen, wird der Mittelwert des Feldes über die euklidische Raum-Zeit, die „Magnetisierung“ $\frac{1}{V} \sum_x \vec{\phi}(x)$, separat als „kollektive Variable“ behandelt, so daß der Grenzwert $j \rightarrow 0$ selbst im endlichen Volumen keine Schwierigkeiten bereitet. Die Berechnung des in diesem Sinne „eingeschränkten“ Zustandsintegrals in der 1-Schleifen-Näherung der Störungstheorie (in der renormierten Kopplung g_R) hat in dem untersuchten Bereich in der Nähe des Phasenüberganges zur korrekten Beschreibung der Volumeneffekte geführt (s. Abschn. 5.3).

Um in den Formeln Faktoren $\sqrt{2\kappa\sqrt{1+4\omega}}$ zu vermeiden, wird in diesem Kapitel die Kontinuumsnormierung der Felder benutzt (vergl. Gl. (3.4) – (3.8)).

5.1 Effektive Feldtheorien und Volumeneffekte

Zunächst einige Anmerkungen dazu, wie die beiden in den Abschnitten 5.2 und 5.3 diskutierten Methoden zur Behandlung der Volumeneffekte im Rahmen effektiver Feldtheorien verstanden werden können. In dem Diagramm B auf Seite 60 sind Anwendungsbereiche der einzelnen Methoden graphisch veranschaulicht.

Aus der statistischen Physik ist bekannt, daß das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung nur im thermodynamischen Limes auftritt. Desweiteren besitzt das System im unendlichen Volumen masselose Goldstone-Moden und ein kontinuierliches Energiespektrum, während das Energiespektrum im endlichen Volumen diskret ist und folglich eine Energielücke hat.

Eine Methode, mit Hilfe derer dennoch das symmetriebrechende Verhalten im unendlichen Volumen durch Messungen bei endlichem Volumen untersucht werden kann, gebraucht die Einführung einer symmetriebrechenden äußeren Quelle j – dieser entspricht ein äußeres Magnetfeld in Spinsystemen bzw. ein Quarkmassen-Term in der QCD. Da der Quellterm die Goldstone-Bosonen mit einer Masse m_π versieht, sind die Volumeneffekte exponentiell mit $\exp(-m_\pi L)$ unterdrückt, sofern die Ausdehnung L groß genug ist. Im zweiten Teil dieser Arbeit (ab Seite 115) wird dies stets vorausgesetzt. Auch wenn diese Bedingung nicht erfüllt ist, kann die Volumenabhängigkeit des Zustandsintegrals $Z(j)$ für kleine Werte des äußeren Stromes mit Hilfe der chiralen Störungstheorie untersucht werden. Die Volumeneffekte sind sowohl für $m_\pi L < 1$ als auch für $m_\pi L \gtrsim 1$ meßbar und werden durch die sogenannte u -Entwicklung bzw. v -Entwicklung der chiralen Störungstheorie beschrieben (s. Abschn. 5.2).

In der chiralen Störungstheorie wird (zunächst im unendlichen Volumen) die allgemeine Lagrangedichte für die Goldstone-Bosonen aufgestellt, die die Symmetrien des fundamentalen Modelles – in diesem Fall der $O(N)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie – respektiert und die als effektive Theorie zu diesem Modell zu verstehen ist. Hintergrund

hierbei ist, daß die Eigenschaften des Systems bei niedrigen Energien von den leichten Goldstone-Moden dominiert sind. Ganz allgemein können in „effektiven Feldtheorien“ Vorhersagen zu einer Quantenfeldtheorie bei niedrigen Energien gemacht werden, d.h. deutlich unterhalb eines ultravioletten Impuls-Abschneideparameters werden die physikalischen Eigenschaften relativ gut durch eine „effektive Wirkung“ beschrieben.

Das Zustandsintegral $Z(j)$ kann im Sinne der effektiven Feldtheorien als ein Pfadintegral über die $N-1$ Goldstone-Boson-Freiheitsgrade dargestellt werden:

$$Z(j) = \mathcal{N}' \int \mathcal{D}\pi e^{-S_{eff}\{\pi, j\}}. \quad (5.1)$$

Dabei besteht die effektive Lagrangedichte aus einer Entwicklung in Potenzen des Feldes π , seiner Ableitungen und zusätzlich der äußeren Quelle j . Diese Größen werden zu $O(N)$ -invarianten Ausdrücken zusammengefaßt und mit zunächst unbestimmten Kopplungen versehen. Zählt man die äußere Quelle wie eine feste Potenz der Impulse, so stehen in der effektiven Wirkung im Sinne der Niederenergie-Entwicklung alle $O(N)$ -symmetrischen Terme bis zur einer bestimmten Potenz der Impulse (in Abschn. 5.2 bis $\mathcal{O}(p^4)$) [77]. In jeder Ordnung tritt auf diese Weise eine endliche Zahl zunächst freier Niederenergie-Konstanten auf, die erst durch das darunterliegende Modell identifiziert werden. Unter Benutzung der Ward-Identitäten in Verbindung mit der zugrundeliegenden $O(N)$ -Symmetrie und der Feldgleichungen kann die Zahl der freien Parameter und somit der unabhängigen Terme in der effektiven Lagrangedichte eingeschränkt werden [67, 69].

Das Zustandsintegral $Z(j)$ aus Gl. (5.1) wird mit den Methoden der Störungstheorie, die hier aus historischen Gründen „chirale Störungstheorie“ genannt wird, berechnet. Ein wichtiger Punkt hierbei ist, daß die höheren Schleifen-Ordnungen in der chiralen Störungstheorie automatisch auch eine höhere Ordnung in den Impulsen darstellen. Die Kopplungen in der effektiven Lagrangedichte der Goldstone-Bosonen sind volumenunabhängig, falls die Felder der fundamentalen Theorie im endlichen Volumen mit periodischen Randbedingungen definiert werden, d.h. die effektive Lagrangedichte im endlichen Volumen stimmt mit der entsprechenden Lorentz-invarianten Größe im unendlichen Volumen überein [70]. Die spezielle Gestalt der effektiven Wirkung – sprich Entwicklung in den Potenzen der Impulse $p \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^d$ – führt so im endlichen Volumen $V = L^d$ auf natürliche Weise zu einer Entwicklung in Potenzen von $1/L^{d-2}$. Die Entwicklungskoeffizienten sind durch die (fundamentale) Theorie im unendlichen Volumen definiert.

Bei Annäherung an den Phasenübergang der $O(N)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie erreicht selbst die Korrelationslänge des σ -Teilchens die Größenordnung der Gitterausdehnung L . Das Produkt $m_\sigma L$ ist zu klein, um die Volumeneffekte aufgrund der σ -Masse zu unterdrücken und die effektive Theorie der Goldstone-Bosonen verliert ihren universellen Charakter. Da aber wegen der Trivialität der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie im kritischen Bereich bei großen Korrelationslängen der σ -Teilchen kleine Werte der renormierten Kopplung erwartet werden, bietet sich die störungstheoretische Entwicklung in der renormierten Kopplung g_R an (s. Abschn. 5.3).

In diesem Fall macht man sich ein Verfahren zunutze, das das sogenannte **eingeschränkte effektive Potential** verwendet und nicht die Einführung einer symmetriebrechenden äußeren Quelle j erfordert [73]: Selbst im endlichen Volumen V äußert sich die spontane Symmetriebrechung dadurch, daß das Feld $\vec{\phi}(x)$ an unterschiedlichen Punkten stark korreliert, parallel zur Richtung der momentanen Magnetisierung¹

$$\vec{\mathcal{M}} = \frac{1}{V} \sum_x \vec{\phi}(x) \quad (5.2)$$

ausgerichtet ist. *A priori* ist im endlichen Volumen keine Richtung der Magnetisierung ausgezeichnet, falls die Wirkung $O(N)$ -symmetrisch ($j = 0$) ist. Deshalb verschwindet zwar der Ordnungsparameter $\langle \vec{\phi}(x) \rangle$, doch wenn man die Eigenschaften eines Systems bei festen Werten der Magnetisierung $\vec{\mathcal{M}}$ in Form des eingeschränkten effektiven Potentials aufzeichnet [68], so unterscheiden sich die Eigenschaften der untersuchten Observablen im endlichen Volumen nicht wesentlich von den entsprechenden Größen im unendlichen Volumen.

Das Zustandsintegral $Z(j)$ kann im Sinne der effektiven Feldtheorien auch als ein gewöhnliches Integral über den Impuls-Null-Anteil des skalaren Feldes, nämlich die Magnetisierung $\vec{\mathcal{M}}$, dargestellt werden:

$$Z(j) = \mathcal{N} \int d^N \mathcal{M} e^{Vj\mathcal{M}_N - V\mathcal{U}(\mathcal{M})} \quad (5.3)$$

und die effektive Wirkung ($V\mathcal{U}(\mathcal{M}) - Vj\mathcal{M}_N$) ist eine Funktion der „niederenergetischen“ Größe $\mathcal{M}$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei die N -Richtung im Integranden in Richtung von j definiert. Das hier eingeführte, sogenannte *eingeschränkte effektive Potential* $V\mathcal{U}(\mathcal{M})$ [68] beschreibt die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Magnetisierung $\mathcal{M}$ im endlichen Volumen V und bei verschwindender äußerer Quelle j :

$$e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M})} = \tilde{Z}(\mathcal{M}) = \int \mathcal{D}\phi \delta\left(\mathcal{M} - \frac{1}{V} \sum_x \phi(x)\right) e^{-S\{\phi, j=0\}}. \quad (5.4)$$

Aufgrund der $O(N)$ -Symmetrie hängen sowohl $Z(j)$ als auch $\tilde{Z}(\mathcal{M})$ nur von den Beträgen des äußeren Stromes j bzw. der Magnetisierung $\mathcal{M}$ ab. Abbildung 5.1 zeigt die diskretisierte Form des effektiven Potentials $\mathcal{U}(\mathcal{M})$, das sich aus den gemessenen Verteilungen $\tilde{P}_{\kappa_0}(\mathcal{M})$ aus Abbildung 4.2 des vorangehenden Kapitel berechnen läßt.

Für ein großes Volumen wird die Verteilung sehr scharf, so daß die wahrscheinlichsten Werte der Magnetisierung im Bereich der Minima von $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ angesiedelt sind. Im thermodynamischen Limes geht $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ in das *gewöhnliche* effektive Potential über [68]. Gibt es mehrere absolute Minima, die sich ineinander durch Symmetrietransformationen überführen lassen, so ist diese Symmetrie spontan gebrochen. Bei der einkomponentigen Φ^4 -Theorie entspricht diesem Bild das effektive Potential mit einer Mulde in der symmetrischen Phase und mit zwei Mulden in der gebrochenen Phase (s. Skizze 5.2). In der gebrochenen Phase der N -komponentigen Φ^4 -Theorie stellt man sich die Mulde des effektiven Potentials $O(N-1)$ -rotationssymmetrisch

¹In dieser Arbeit werden die Attribute „momentan“ und „eingeschränkt“ vor der Magnetisierung bzw. dem effektiven Potential auch häufig weggelassen.

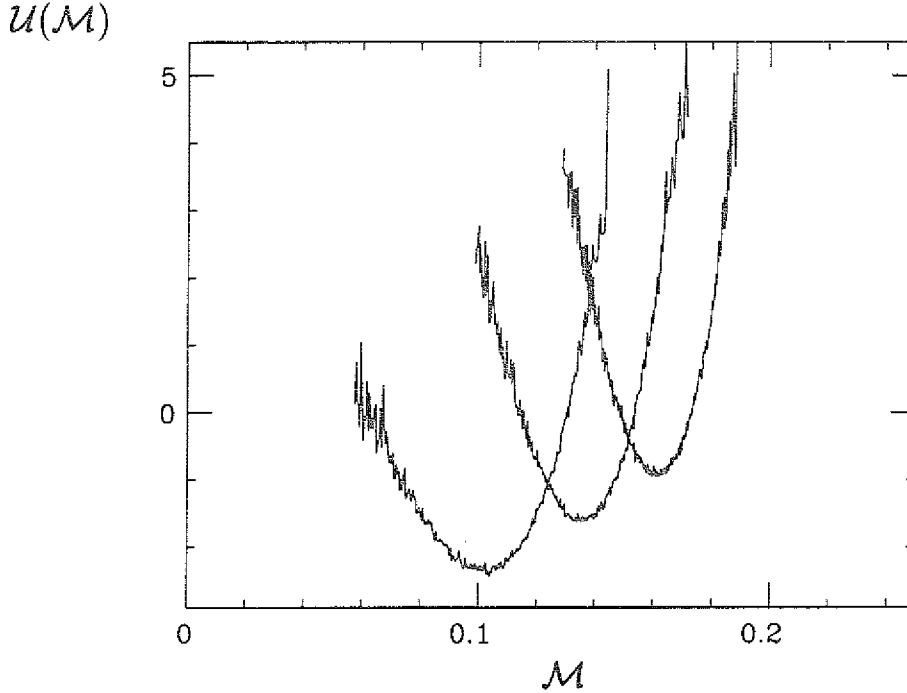


Abbildung 5.1: Das eingeschränkte effektive Potential $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ für $L=16$ im Fall der Standard-Wirkung ($\kappa_0=0.306, 0.308, 0.310$ und $J=0$).

als „Mexikanerhut“ vor. In diesem Bild ist die Krümmung des effektiven Potentials am Minimum ein Maß für die Massen der auftretenden Freiheitsgrade: ein massiver radialer Freiheitsgrad entsprechend dem σ -Teilchen und $N-1$ masselose transversale Goldstone-Moden. Dieses Bild ist insofern irreführend, da dem effektiven Potential, das auf dem endlichen Gitter eine konvexe und analytische Funktion ist, im thermodynamischen Limes nur die Eigenschaft der Analytizität verloren gehen kann [35]. Die spontane Symmetriebrechung wird dadurch ermöglicht, dass das effektive Potential auf einem symmetrischen Intervall $[-v_0, v_0]$ konstant ist (s. Skizze 5.2). Die Randwerte des konvexen Bereichs, in dem das effektive Potential konstant ist, sind extremale Gleichgewichtszustände.

Mit Hilfe einer Sattelpunktentwicklung um das Minimum $\mathcal{M}_0$ des *eingeschränkten* effektiven Potentials $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ kann die Volumenabhängigkeit des Zustandsintegrals $Z(j)$ in Potenzen von $1/\sqrt{V}$ entwickelt werden. Dazu müssen das effektive Potential $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ und seine Ableitungen am Minimum bekannt sein. In Abschnitt 5.3 wird $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ in der 1-Schleifen-Näherung der Störungstheorie (in der renormierten Kopplung g_R) berechnet. Die Renormierungskonstanten werden im unendlichen Volumen und für verschwindende äußere Quelle in der Gitterregularisierung mit der Standardwirkung berechnet.

Die beiden Szenarien für die Annäherung der spontanen Symmetriebrechung im endlichen Volumen – einerseits mit symmetriebrechender äußerer Quelle und auf der

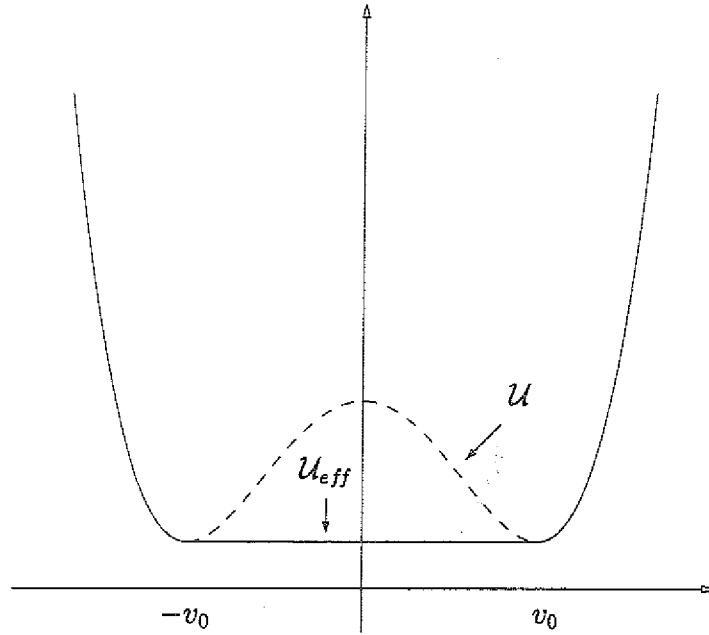


Abbildung 5.2: Ein Beispiel für ein *konventionelles* effektives Potential $\mathcal{U}_{eff}$, das, obwohl symmetrisch und konvex, aufgrund des Verlustes der Analytizität in $\pm v_0$ die Interpretation der spontanen Symmetriebrechung ermöglicht. Das *eingeschränkte* effektive Potential $\mathcal{U}$ besitzt in der gebrochenen Phase die „klassische“ Doppelmulden-Gestalt und geht im thermodynamischen Limes in $\mathcal{U}_{eff}$ über [68].

anderen Seite durch die Projektion auf die (Richtung der) Magnetisierung – sind ineinander überführbar, wenn in Gl. (5.3) die Winkelintegration ausgeführt worden ist:

$$Z(j) = 2\pi^{\frac{N}{2}} \int_0^\infty d\mathcal{M} \mathcal{M}^{N-1} Y_N(Vj\mathcal{M}) e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M})}. \quad (5.5)$$

Dabei können die Funktionen $Y_N(x) = (x/2)^{-(N/2-1)} I_{N/2-1}(x)$ durch modifizierte Besselfunktionen ausgedrückt werden (s. Gl. 4.29). Auf diese Weise lassen sich Ordnung für Ordnung die Entwicklungsparameter von $Z(j)$ aus der chiralen Störungstheorie mit den renormierten Größen aus der störungstheoretischen Näherung von $\tilde{Z}(\mathcal{M})$ identifizieren. Man beachte, daß sowohl die Parameter aus der chiralen Störungstheorie als auch die renormierten Größen aus der Störungstheorie in der quartischen Kopplung im unendlichen Volumen definiert sind. Umgekehrt lassen sich auch die Verteilung der Magnetisierung $\tilde{Z}(\mathcal{M})$ und die zugehörigen Momente, die numerisch einfach zugänglich sind (s. Abschnitte 4.3 und 4.4), durch das Zustandsintegral $Z(j)$ aus der chiralen Störungstheorie ausdrücken: die Funktionen $j^{(N-1)/2} Z(j)$ (für imaginäre Ströme j) und $\mathcal{M}^{(N-1)/2} \tilde{Z}(\mathcal{M})$ sind Hankel-Transformierte voneinander [73, 74]. Auf diese Weise lassen sich die Volumeneffekte des Zustandsintegrals $Z(j)$, wie sie im Rahmen der chiralen Störungstheorie erhalten werden, mit denen von der Verteilung der Magnetisierung $\tilde{Z}(\mathcal{M})$ aus der renormierten Störungstheorie in Kombination mit der Sattelpunktentwicklung miteinander vergleichen.

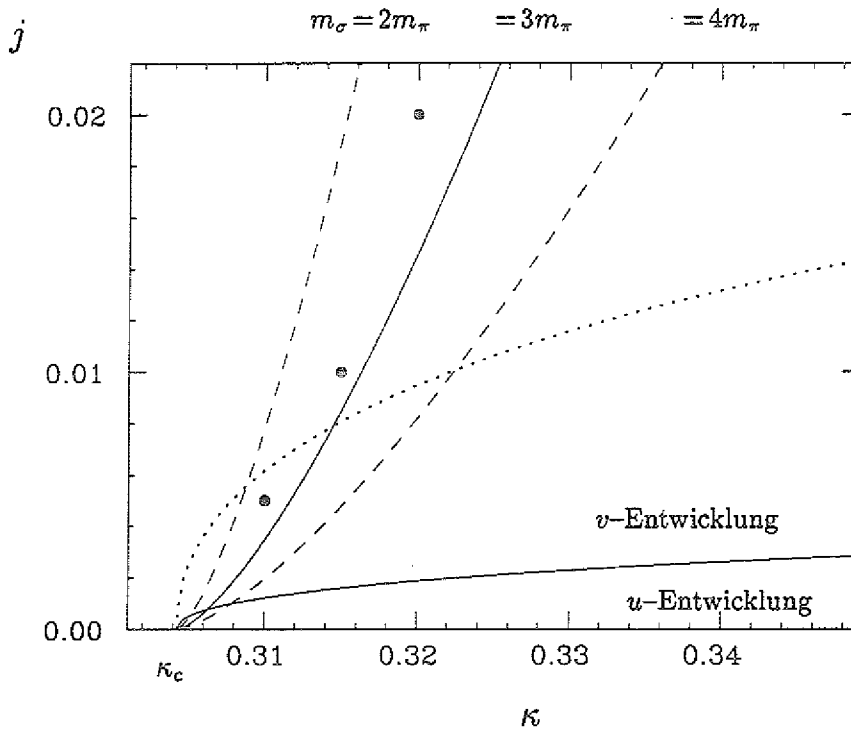


Abbildung 5.3: Linien konstanter Massenverhältnisse m_σ/m_π und $m_\pi L$ in der κ - j Ebene. In die zunächst qualitative Veranschaulichung sind letztendlich die neuesten Meßergebnisse zu den Skalengesetzen aus den folgenden Kapiteln eingegangen.

$m_\pi L \approx 1$ trennt die u - (unterhalb) und die v -Entwicklung (oberhalb): dies verdeutlicht für $L = 12$ die untere durchgezogene Linie.

Die zweite durchgezogene Linie zum Verhältnis $m_\sigma/m_\pi = 3$ – in diesem Bereich erwartet man gerade die σ -Resonanz – hilft bei der Wahl der Parameter (κ , j) im zweiten Teil der Arbeit (dicke Punkte). Die gestrichelten Linien zu $m_\sigma/m_\pi = 2$ und $m_\sigma/m_\pi = 4$ fassen den Parameterbereich, in dem elastische Streuung erwartet wird, links bzw. rechts ein. Inwieweit hierbei Volumeneffekte durch Vakuumpolarisationen der Pionen unterdrückt sind, veranschaulicht die gepunktete Linie: Für $L = 16$ ist oberhalb der Linie $m_\pi L \gtrsim 3$ zu erwarten.

Diagramm B auf Seite 60 faßt die Hauptcharakteristika der unterschiedlichen verwendeten Methoden zur Beschreibung der Volumeneffekte graphisch zusammen.

Volumenabhängigkeit in der gebrochenen Phase der $O(N)$ - Φ^4 -Theorie

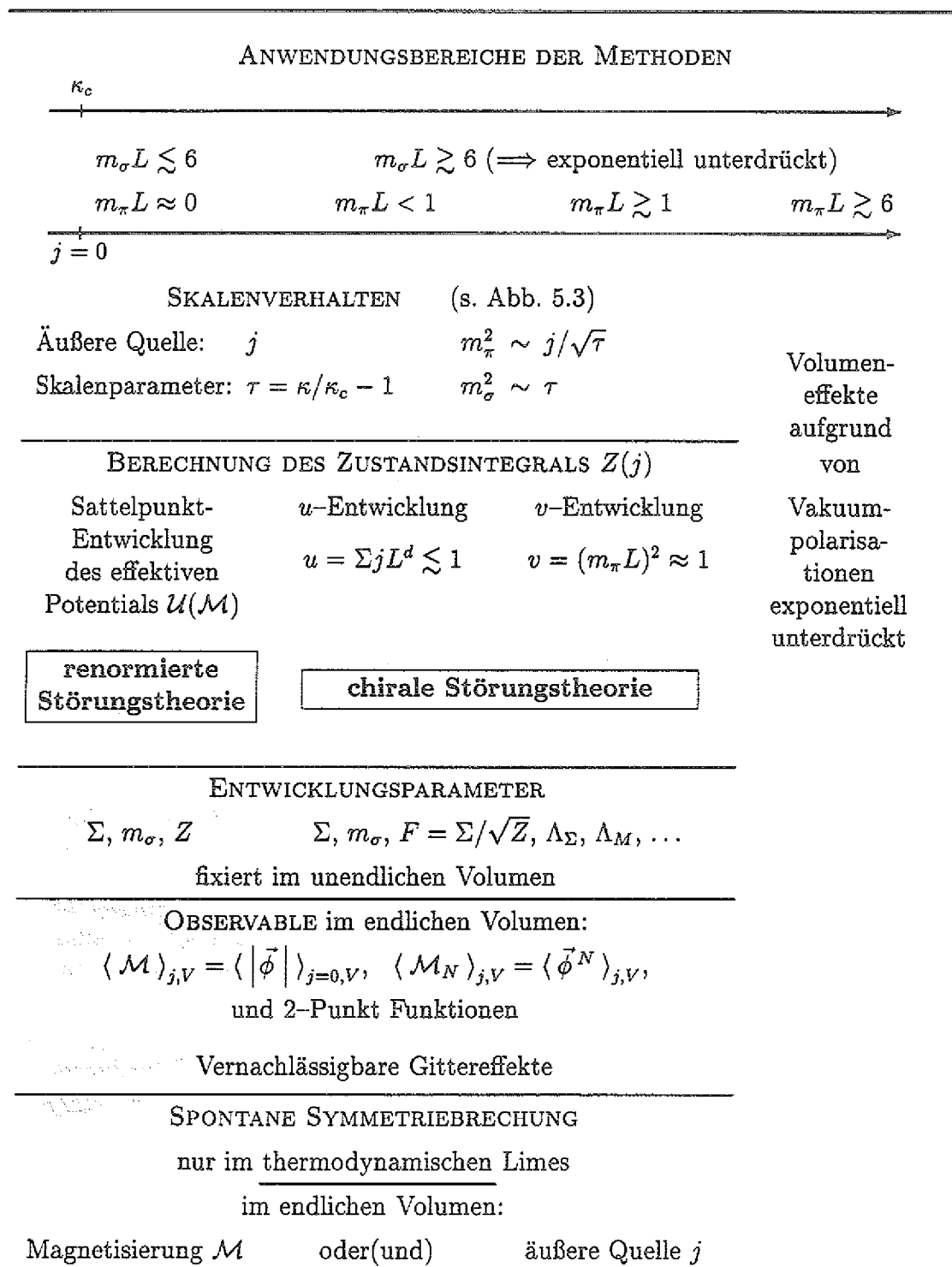


Diagramm B: Unterschiedliche Methoden zur Erklärung der Volumeneffekte sortiert nach ihren Anwendungsbereichen, wie sie in diesem Kapitel vorgestellt werden.

5.2 Volumenabhängigkeit in der chiralen Störungstheorie

Ist eine kontinuierliche Symmetrie spontan gebrochen, so kann, volle Lorentz-Kovarianz vorausgesetzt, die Existenz masseloser Teilchen (Goldstone-Bosonen) allgemein bewiesen werden (Goldstone-Theorem). Auch wenn kleine explizite Symmetriebrechungseffekte (z.B. Terme mit äußerer Quelle) zugelassen werden, bleiben diese Goldstone-Moden leicht und bestimmen die Niederenergie-Eigenschaften des Systems.

In der Physik der Pionen wurde die Dynamik der Goldstone-Bosonen im Zusammenhang mit der starken Wechselwirkung zum ersten Mal diskutiert. Im Rahmen der effektiven Feldtheorien wird die allgemeinste Lagrangedichte für die Goldstone-Bosonen aufgestellt, die die Symmetrien des zugrundeliegenden fundamentalen Modells – in diesem Fall der QCD – respektiert. Setzt man voraus, daß die Wechselwirkung der Goldstone-Bosonen bei niedrigen Energien schwach ist, so kann eine systematische störungstheoretische Entwicklung der effektiven Wirkung aufgestellt werden, bei der in jeder Ordnung eine endliche Zahl zunächst unbekannter Niederenergie-Konstanten auftritt. Diese freien Parameter werden erst durch das darunterliegende Modell identifiziert.

Die effektive Niederenergiethorie besitzt modellunabhängigen, universellen Charakter und beschreibt ebenfalls $O(N)$ -Ferromagneten unterhalb der kritischen Temperatur wie auch den Fall eines schweren Higgs-Teilchens im Standard-Modell, wobei die longitudinalen Komponenten der Vektorbosonen die Rolle der Goldstone-Bosonen übernehmen. Da diese Methode zum ersten Mal im Zusammenhang mit der chiralen Symmetriebrechung angewendet wurde, ist sie unter dem Namen „chirale Störungstheorie“ in die physikalische Literatur eingegangen.

Werden die bosonischen (oder fermionischen) Felder der fundamentalen Theorie im endlichen Volumen mit periodischen (bzw. antiperiodischen) Randbedingungen definiert, so sind die Kopplungen in der effektiven Lagrangedichte der Goldstone-Bosonen volumenunabhängig, d.h. die effektive Lagrangedichte stimmt mit der entsprechenden Lorentz-invarianten Größe im unendlichen Volumen überein [70]. Auch die Effekte endlichen Volumens $V = L^d$ werden durch die leichten Goldstone-Bosonen kontrolliert: Falls die Korrelationslänge der Goldstone-Moden (definiert im unendlichen Volumen) und die Ausdehnung L größer als alle anderen Korrelationslängen der Theorie sind, werden die führenden Volumeneffekte von den Goldstone-Bosonen dominiert. Dann ist die chirale Störungstheorie, die für jede Theorie in der gebrochenen Phase mit Goldstone-Bosonen für $d > 2$ Dimensionen angewendet werden kann, ein adäquates Mittel zur Berechnung der Volumenabhängigkeiten der untersuchten Observablen in Potenzen von $1/L^{d-2}$.

5.2.1 Chirale Störungstheorie für die spontan gebrochene $O(N)$ -Symmetrie

Hier wird die chirale Störungstheorie für $O(N)$ -invariante Feldtheorien mit einem N -komponentigen skalaren Feld diskutiert, das sich gemäß der fundamentalen Darstellung der $O(N)$ transformiert. Das System wird in einer periodischen Box des

Volumens V in der Phase betrachtet, in der die $O(N)$ -Symmetrie für $V \rightarrow \infty$ spontan zur $O(N-1)$ gebrochen ist. Die Volumenabhängigkeit des Zustandsintegrals $Z(j)$ wird von der Größe des äußeren Stromes j im Verhältnis zum Volumen $V = L^d$ der (als kontinuierlich angenommenen) Raum-Zeit-Box bestimmt.

Um eine kompakte Schreibweise zu etablieren, werden folgende dimensionslose Variable definiert:

$$u = \Sigma j L^d, \quad v = m_\pi^2 L^2, \quad w = F^2 L^{d-2}. \quad (5.6)$$

In Übereinstimmung mit den Konventionen im nächsten Abschnitt 5.3 ist hierbei Σ der Felderwartungswert im unendlichen Volumen bei verschwindender äußerer Quelle (erst $V = L^d \rightarrow \infty$, dann $j \rightarrow 0$). Die Konstante F tritt als Kopplung in der effektiven Wirkung in der niedrigsten Ordnung der chiralen Störungstheorie auf und charakterisiert die Niederenergie-Eigenschaften der entsprechenden fundamentalen Theorie im unendlichen Volumen: Werden die $(N-1)$ Goldstone-Bosonen in dem Funktionalintegral (5.1) durch ein $O(N)$ -Vektorfeld der Länge 1 beschrieben: $\pi^\alpha \pi^\alpha = 1$, so enthält die effektive Wirkung [77]

$$S_{eff}\{\pi, j\} = \int dx \frac{1}{2} F^2 (\partial_\mu \pi^\alpha \partial_\mu \pi^\alpha) - \Sigma (j^\alpha \pi^\alpha) + \dots \quad (5.7)$$

in niedrigster Ordnung nur die zwei Konstanten F und Σ . In der QCD ist F die Pion-Zerfallskonstante, in den Spin-Modellen ist F^2 das Helizitätsmodul und in unserem Fall, der $O(N)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie, der renormierte Felderwartungswert.

Die globale $O(N)$ -Symmetrie garantiert, daß die Generatoren

$$\mathcal{J}_\mu^{\alpha\beta} = \phi^\alpha \partial_\mu \phi^\beta - \phi^\beta \partial_\mu \phi^\alpha \quad (\alpha, \beta = 1, \dots, N) \quad (5.8)$$

erhaltene Ströme sind. Bei Anwesenheit einer in N -Richtung zeigenden äußeren Quelle j erhält die Divergenz des Stromes $\mathcal{J}_\mu^{aN}$ ($a = 1, \dots, N-1$) einen nichtverschwindenden Beitrag proportional zum symmetriebrechenden Parameter j :

$$\partial_\mu \mathcal{J}_\mu^{aN} = -j \phi^a. \quad (5.9)$$

Die zugehörigen Ward-Takahashi-Identitäten für die beiden 2-Punktfunktionen $\langle \mathcal{J}_\mu^{aN}(x) \phi^b(y) \rangle$ und $\langle \mathcal{J}_\mu^{aN}(x) \mathcal{J}_\nu^{bN}(y) \rangle$ liefern für kleine Werte der Impulse und von j (d.h. in niedrigster Ordnung von j) die Beziehungen:

$$Z = \frac{\Sigma^2}{F^2}, \quad \text{und} \quad m_\pi^2 = j \frac{\Sigma}{F^2}. \quad (5.10)$$

Die letztere Beziehung kann auch in den dimensionslosen Variablen ausgedrückt werden:

$$u = v w. \quad (5.11)$$

Die Variable $1/w \sim 1/L^{d-2}$ kontrolliert die Volumeneffekte, während u bzw. v in den jeweils entsprechenden Entwicklungen der chiralen Störungstheorie konstant gehalten werden.

Die Eigenschaften des Systems in dem Bereich, in dem die Symmetrie im Grenzwert $j \rightarrow 0$ wiederhergestellt wird, wird durch die sogenannte u -Entwicklung² des Zustandsintegrals $Z(j)$ kontrolliert:

$$j = \mathcal{O}(1/L^d) \quad \text{„}u\text{-Entwicklung“} \quad (5.12)$$

Ausgedrückt durch die dimensionslosen Variablen u, v, w bedeutet die u -Entwicklung im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} 1 \gtrsim v &\sim L^{2-d} \rightarrow 0, \\ 1 \lesssim w &\sim L^{d-2} \rightarrow \infty, \\ \text{wobei } 1 \gtrsim u &= \text{const.} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Hier wird nur das Ergebnis des Zustandsintegrals $Z(j)$ in der u -Entwicklung bis zur Ordnung $1/L^{2d-4}$ angegeben³ [77]:

$$Z(j) = \mathcal{N} Y_N(\rho_1 u) e^{\rho_2 u^2/w^2} \left(1 + \mathcal{O}(L^{6-3d}) \right). \quad (5.14)$$

Das Argument $u = \Sigma j L^d$ aus (5.14) wird im Limes $V \rightarrow \infty$ ($w = F^2 L^{d-2} \rightarrow \infty$) festgehalten. Die Normierungskonstante $\mathcal{N}$ ist zwar volumenabhängig aber unabhängig von der äußeren Quelle j .

In $d=3$ bzw. 4 Dimensionen sind ρ_1 und ρ_2 durch

$$\rho_1 = 1 + \frac{N-1}{2} \frac{\beta_1}{w} - \frac{(N-1)(N-3)}{8w^2} \left(\beta_1^2 - 2\beta_2 - \delta_{d,4} \frac{1}{4\pi^2} \ln(\Lambda_M L) \right), \quad (5.15)$$

$$\rho_2 = \frac{N-1}{4} \left[\beta_2 + \delta_{d,4} \frac{1}{8\pi^2} \ln(\Lambda_\Sigma L) \right]. \quad (5.16)$$

gegeben. Die hier auftretenden Größen β_1 und β_2 hängen nur von der Dimension und der Gestalt der Raum-Zeit-Box ab, d.h. den Verhältnissen $L_1 : \dots : L_d$. Sie werden im Anhang C ausführlich diskutiert (siehe auch Tabelle C.1). Für eine kubische Box mit $L_1 = \dots = L_d$ berechnet man

$$\beta_1 = 0.225785, \quad \beta_2 = 0.010608 \quad (d=3), \quad (5.17)$$

$$\beta_1 = 0.140461, \quad \beta_2 = -0.020305 \quad (d=4). \quad (5.18)$$

In $d=4$ Dimensionen enthalten die Größen ρ_1 und ρ_2 zwei weitere Konstanten aus der effektiven Niederenergie-Wirkung, die logarithmischen Skalen Λ_M und Λ_Σ : Diese Renormierungsgruppen-invarianten Skalen bestimmen die Abhängigkeit des Felderwartungswertes Σ bzw. der Goldstone-Boson-Masse m_π von der äußeren Quelle j im unendlichen Volumen und beschreiben die logarithmischen Korrekturen in den Volumenentwicklungen.

Im Bereich der u -Entwicklung ist die Masse m_π klein im Vergleich zur inversen Ausdehnung der Box: $m_\pi L \ll 1$. Im umgekehrten Extremfall, $m_\pi L \gg 1$, der nicht

²Sie wird in [71, 73] mit ϵ -Entwicklung bezeichnet.

³Die implizite j -Abhängigkeit der Funktion $Z(j)$ durch die dimensionslosen Größen u, v wird hier vorausgesetzt.

durch die u -Entwicklung abgedeckt ist, sind die Volumeneffekte exponentiell mit $\exp(-m_\pi L)$ unterdrückt. In einem dazwischenliegenden Bereich, in dem die Comptonwellenlänge der Goldstone-Bosonen von derselben Größenordnung wie die Ausdehnung L der Box ist, kann auf die v -Entwicklung⁴ der chiralen Störungstheorie zurückgegriffen werden:

$$j = \mathcal{O}(1/L^2) \quad \text{„}v\text{-Entwicklung“} \quad (5.19)$$

Ausgedrückt durch die dimensionslosen Variablen u, v, w bedeutet die v -Entwicklung im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} 1 &\lesssim u \sim L^{d-2} \rightarrow \infty, \\ 1 &\lesssim w \sim L^{d-2} \rightarrow \infty, \\ \text{wobei} \quad 1 &\lesssim v = \text{const.} \end{aligned} \quad (5.20)$$

Das Zustandsintegral $Z(j)$, bzw. die durch

$$Z(j) = e^{-V\mathcal{F}(j)} \quad (5.21)$$

definierte freie Energiedichte $\mathcal{F}(j)$ werden in Potenzen von $1/L$ entwickelt, wobei $v = (m_\pi L)^2 = \Sigma j L^2 / F^2$ im Grenzfall $V \rightarrow \infty$ festgehalten wird. Die ersten Terme der v -Entwicklung der freien Energiedichte $\mathcal{F}(j)$ lauten [71]:

$$\mathcal{F}(j) = -\mathcal{V}(j) - \frac{N-1}{2} \frac{1}{L^d} \left(\bar{g}_0(\sqrt{v}) + \ln v \right) + \mathcal{O}(L^{2-2d}) \quad (5.22)$$

Bis auf das Vorzeichen stellt die Größe $\mathcal{V}(j)$ die Energiedichte des Vakuums dar, während der zweite Term die freie Energiedichte eines freien Gases mit $N-1$ Bose-Freiheitsgraden beschreibt. Eine ausführliche Diskussion der Funktion $\bar{g}_0$ befindet sich in Anhang C.

Die Vakuumenergiedichte kann in Potenzen von j (bzw. $m_\pi^{d-2}/F^2 \sim v^{d/2-1}/w$) entwickelt werden. Die niedrigsten Terme der Entwicklung sind in $d=3$ bzw. $d=4$ Dimensionen:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(j) &= \frac{vw}{L^3} \left\{ 1 + \frac{N-1}{12\pi} \frac{\sqrt{v}}{w} + \mathcal{O}(1/L^2) \right\} \quad (d=3), \\ \mathcal{V}(j) &= \frac{vw}{L^4} \left\{ 1 + \frac{N-1}{64\pi^2} \frac{v}{w} \left(\ln \frac{(\Lambda_\Sigma L)^2}{v} + \frac{1}{2} \right) + \mathcal{O}(1/L^4) \right\} \quad (d=4). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Eine Entwicklung bis zur nächsten Ordnung findet sich bei M. Gökeler und H. Leutwyler [73]. Die v -Entwicklung wird hier nur der Vollständigkeit halber angegeben. Auf sie wird in der späteren Analyse nicht weiter zurückgegriffen. In dem Bereich $(1/L^{d-2} \ll v \ll 1)$ stimmen die beiden Entwicklungen überein.

⁴Sie wird in [71, 73] mit p -Entwicklung bezeichnet.

5.2.2 Volumenabhängigkeit der untersuchten Größen

Ist das Zustandsintegral $Z(j)$ gegeben, so kann beispielsweise der Erwartungswert des Feldes ϕ^N parallel zum äußeren Strom direkt durch Ableitung nach der äußeren Quelle j gewonnen werden:

$$\langle \phi^N \rangle_{j,V} = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial j} \ln Z(j) \quad (5.24)$$

Die longitudinale Suszeptibilität $\chi_{\parallel}$ erhält man durch erneutes Ableiten

$$\chi_{\parallel} = \frac{\partial \langle \phi^N \rangle_{j,V}}{\partial j} \quad (5.25)$$

und für die transversale Suszeptibilität $\chi_{\perp} \delta_{\alpha\beta} = \langle \sum_x \phi^{\alpha}(x) \phi^{\beta}(0) \rangle_{j,V}$ ergibt sich die einfache kinematische Identität

$$\chi_{\perp} = \frac{\langle \phi^N \rangle_{j,V}}{j} \quad (5.26)$$

als Folge der Tatsache, daß das Zustandsintegral $Z(j)$ unabhängig von der Richtung des Stromes j ist.

In der u -Entwicklung erhält man aus Gl. (5.14) für den Erwartungswert der Magnetisierung ($u = \Sigma j L^d$, $w = F^2 L^{d-2}$)

$$\begin{aligned} \langle \phi^N \rangle_{j,V} &= \Sigma \frac{\partial \ln Z}{\partial u} \\ &= \Sigma \left\{ \rho_1 \frac{Y'_N(\rho_1 u)}{Y_N(\rho_1 u)} + 2\rho_2 \frac{u}{w^2} + \mathcal{O}(L^{6-3d}) \right\}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Analog berechnet man diesen Erwartungswert mit den Beziehungen (5.22) und (5.23) in der v -Entwicklung in $d = 3$ und $d = 4$ Dimensionen ($v = (m_{\pi} L)^2$, $w = F^2 L^{d-2}$):

$$\begin{aligned} \langle \phi^N \rangle_{j,V} &= \Sigma \frac{1}{w} \frac{\partial \ln Z}{\partial v} \\ &= \Sigma \left\{ 1 - \frac{N-1}{2} \frac{1}{w} \left(\bar{g}_1(\sqrt{v}) + \frac{1}{v} \right) + \frac{N-1}{8\pi} \frac{\sqrt{v}}{w} \right\} \quad (d=3), \\ \langle \phi^N \rangle_{j,V} &= \Sigma \left\{ 1 - \frac{N-1}{2} \frac{1}{w} \left(\bar{g}_1(\sqrt{v}) + \frac{1}{v} \right) + \frac{N-1}{32\pi^2} \frac{v}{w} \ln \frac{(\Lambda_{\Sigma} L)^2}{v} \right\} \quad (d=4). \end{aligned} \quad (5.28)$$

Mit den Angaben aus Abschnitt 5.1 ist auch möglich, aus den Entwicklungen des Zustandsintegrals $Z(j)$ für große Volumina, eine entsprechende Entwicklung des eingeschränkten effektiven Potentials $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ zu berechnen. Im Bereich der u -Entwicklung müssen dazu die Beziehungen (5.5) und (5.14) gleichgesetzt werden:

$$\begin{aligned} 2\pi^{\frac{N}{2}} \int_0^{\infty} d\mathcal{M} \mathcal{M}^{N-1} Y_N \left(u \frac{\mathcal{M}}{\Sigma} \right) e^{-v\mathcal{U}(\mathcal{M})} \\ = \mathcal{N} Y_N(\rho_1 u) e^{\rho_2 u^2/w^2} \left(1 + \mathcal{O}(L^{6-3d}) \right). \end{aligned} \quad (5.29)$$

In der führenden Ordnung der Entwicklung, d.h. im thermodynamischen Limes

bei festgehaltenem u , wird die rechte Seite zu $Y_N(u)$. In diesem Grenzfall geht die Verteilung der Magnetisierung $\tilde{Z}(\mathcal{M}) = \exp(-V\mathcal{U}(\mathcal{M}))$ in eine δ -Funktion über:

$$\lim_{\substack{V \rightarrow \infty \\ \mathcal{M} = \text{const.}}} \left(2\pi^{N/2} \Sigma^{N-1} \mathcal{N}^{-1} \right) \tilde{Z}(\mathcal{M}) = \delta(\mathcal{M} - \Sigma), \quad (5.30)$$

die um den Felderwartungswert Σ im unendlichen Volumen und bei verschwindendem äußeren Strom j zentriert ist. Im endlichen Volumen wird die δ -Funktion durch eine Verteilung mit endlicher Breite ersetzt. Mit anwachsendem Volumen strebt das Maximum der Verteilung gegen $\mathcal{M} = \Sigma$ und die Breite gegen Null. Zur Berechnung der Volumeneffekte der Ordnung $1/L^{d-2}$ bzw. $1/L^{2d-4}$ wird die linke Seite in Gl. (5.29) um $\mathcal{M} = \rho_1 \Sigma$ entwickelt:

$$\begin{aligned} Y_N(\rho_1 u) + u \left\langle \frac{\mathcal{M}}{\Sigma} - \rho_1 \right\rangle Y'_N(\rho_1 u) + \frac{1}{2} u^2 \left\langle \left(\frac{\mathcal{M}}{\Sigma} - \rho_1 \right)^2 \right\rangle Y''_N(\rho_1 u) + \dots \\ = Y_N(\rho_1 u) \left\{ 1 + \rho_2 \frac{u^2}{w^2} + \mathcal{O}(L^{6-3d}) \right\}. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Mit Hilfe der Differentialgleichung

$$x Y''_N(x) = -(N-1) Y'_N(x) + x Y_N(x), \quad (5.32)$$

die im folgenden häufig verwendet wird, können die Koeffizienten vor den Funktionen Y_N und Y'_N verglichen werden. Die Gleichheit für beliebige Werte von u gilt genau dann, wenn der Mittelwert der Magnetisierung und die Breite den folgenden Beziehungen genügen:

$$\langle \mathcal{M} \rangle_{j,V} = \langle |\vec{\phi}| \rangle_{j,V} = \Sigma \left(\rho_1 + \frac{N-1}{w^2} \rho_2 \right) + \mathcal{O}(L^{6-3d}), \quad (5.33)$$

$$\chi/V = \left[\langle \mathcal{M}^2 \rangle_{j,V} - \left(\langle \mathcal{M} \rangle_{j,V} \right)^2 \right] = \frac{2\rho_2 \Sigma^2}{w^2} + \mathcal{O}(L^{6-3d}). \quad (5.34)$$

Die höheren Momente sind in dieser Ordnung der u -Entwicklung der chiralen Störungstheorie nicht zugänglich. Der Mittelwert $\langle \mathcal{M} \rangle_{j,V}$ und die Breite χ/V der Magnetisierung werden, wie in Abschnitt 4.4 beschrieben, mittels der Histogramm-Methode aus den numerischen Daten für mehrere κ -Werte sowohl für $j=0$ als auch für $j \neq 0$ berechnet. Die Ergebnisse (5.33) und (5.34) werden mit den Resultaten aus der renormierten Störungstheorie im nächsten Abschnitt zu vergleichen sein, wenn es darum geht, die Volumenabhängigkeiten der numerischen Daten bestmöglich zu erklären.

5.3 Volumenabhängigkeit in renormierter Störungstheorie

Um die Effekte des endlichen Volumens zu berücksichtigen, wird Störungstheorie mit einer Sattelpunktentwicklung des eingeschränkten effektiven Potentials um sein

Minimum kombiniert [81]. Die perturbativen Rechnungen werden in der Gitter-Regularisierung durchgeführt. Befinden wir uns jedoch ausreichend tief im Skalenbereich, so können wir den Kontinuum-Limes in den Endresultaten durchführen, was auch dem Vorgehen im vorangegangenen Abschnitt 5.2 entspricht. Die Renormierungskonstanten werden im unendlichen Volumen unter denselben Renormierungsbedingungen berechnet, die auch M. Lüscher und P. Weisz [32] verwendet haben. D.h. unsere renormierten Parameter sind im unendlichen Volumen definiert und im Grenzwert $L \rightarrow \infty$ ($m_\sigma L \rightarrow \infty$) nehmen die störungstheoretischen Resultate dieselbe Form an, die auch von der chiralen Störungstheorie vorhergesagt wird, wenn die Kopplungskonstanten der chiralen effektiven Lagrangedichte durch die renormierten Parameter Σ , Z , m_σ ausgedrückt werden.

5.3.1 Das eingeschränkte effektive Potential

Die momentane Magnetisierung interpretiert als Blockspin-Feld

Im allgemeinen gibt es unterschiedliche numerische und analytische Methoden, eine effektive Niederenergie-Wirkung aus einer gegebenen fundamentalen Wirkung abzuleiten. Gemeinsam ist im Grunde allen Verfahren, daß sie versuchen, die hochfrequenten Anteile der Felder herauszuintegrieren.

In der Regel werden dann sogenannte Blockspin-Felder eingeführt, die sich aus den Niederenergieanteilen der fundamentalen Felder (hier nur der Impuls-Null-Anteil) zusammensetzen lassen. Sind die fundamentalen Felder auf einem feinen Gitter Γ (oder im Kontinuum) definiert, so werden die Blockspin-Felder auf einem gröberen Gitter Γ_0 mit Gitterkonstante a_0 eingeführt. Die Punkte von Γ werden zu sogenannten Blöcken zusammengefaßt, die mit Punkten von Γ_0 identifiziert werden und über die die fundamentalen Felder zu Blockspins gemittelt werden. Numerisch findet dieses Verfahren beispielsweise beim Mehrgitter-Algorithmus eine Anwendung [43]. Im Higgs-Modell werden die Blockspins einfach als Block-Mittelwerte des skalaren Feldes definiert. Das Konzept des Blockspins läßt sich aber sowohl für den Fall mit dynamischen Fermionen und/oder Eichfeldern als auch für ein zusammengesetztes Higgs-Feld verallgemeinern [79].

Im Kontext der Renormierungsgruppe stellt man sich eine Folge von Blockspin-Transformationen $\Gamma = \Gamma_n \mapsto \Gamma_{n-1} \mapsto \dots \mapsto \Gamma_1 \mapsto \Gamma_0 = \Gamma_{eff}$ vor, bei der die Gitterkonstante immer weiter vergrößert wird: $a_{i-1} = l a_i$, wobei $l > 1$ beispielsweise $l = 2, 3$. Dies liefert einen Renormierungsgruppenfluß von effektiven Wirkungen $S_i \mapsto S_{i-1}$, die durch sogenannte „laufende“ Kopplungen parametrisiert werden. Stimmen zwei effektive Wirkungen in ihren relevanten Operatoren überein, so sagt man, die zugehörigen Theorien würden der gleichen Universalitätsklasse angehören. Die Felder der Wirkungen S_j müssen nicht vom gleichen Typ sein. Zum Teil muß man die Art der Felder bei bestimmten Längenskalen ändern und zusammengesetzte Felder einführen (engl. *compositeness*).

Im allgemeinen wird das fundamentale Feld in einen niederfrequenten und einen hochfrequenten Anteil aufgeteilt [72]. Eine Abbildung M projiziert das fundamentale Feld $\vec{\phi}$ auf den Blockspin $\vec{\mathcal{M}}$:

$$\vec{\phi} = \vec{\varphi} + \vec{\mathcal{M}}, \quad M \vec{\phi} = \vec{\mathcal{M}}, \quad M \vec{\varphi} = 0. \quad (5.35)$$

Das Blockmittel des hochfrequenten Fluktuationsfeldes verschwindet. Ein Spezialfall, auf den wir uns hier konzentrieren wollen, ist ein Gitter Γ_0 mit nur einem Gitterplatz. Der Blockspin ist dann die Magnetisierung $\vec{\mathcal{M}}$ – dies ist im Impulsraum gerade der Anteil des Feldes zu verschwindendem Impuls.

Die momentane Magnetisierung interpretiert als Impuls-Null-Mode

In diesem Abschnitt wird eine etwas andere Lesart der Magnetisierung und somit des eingeschränkten effektiven Potentials eingeführt. Um Infrarot-Divergenzen in Verbindung mit den masselosen Goldstone-Moden zu vermeiden, wird – wie in Abschnitt 5.1 angedeutet – der Impuls Null Anteil im Zustandsintegral abgespalten

$$\begin{aligned} Z(j) &= \int \mathcal{D}\phi e^{-S\{\vec{\phi};j,\omega\}} = \int d^N \mathcal{M} \int \mathcal{D}\varphi e^{-S\{\vec{\varphi}+\vec{\mathcal{M}};j,\omega\}} \\ &= \int d^N \mathcal{M} \tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}}), \end{aligned} \quad (5.36)$$

indem die Integration über die Magnetisierung $\vec{\mathcal{M}}$ – dies ist im Impulsraum gerade der Anteil des Feldes zu verschwindendem Impuls – separat ausgeführt wird. Hierzu wird das Feld durch die Abbildung M in eine Komponente zum Impuls Null und einen Restanteil $\vec{\varphi}$ getrennt (s. Gl. 5.35):

$$\vec{\phi}(x) = \vec{\varphi}(x) + \vec{\mathcal{M}}, \quad M\vec{\phi} = \vec{\mathcal{M}} = \frac{1}{V} \sum_x \vec{\phi}(x), \quad M\vec{\varphi} = \frac{1}{V} \sum_x \vec{\varphi}(x) = 0. \quad (5.37)$$

Die Länge des mittleren Feldes $\vec{\mathcal{M}}$ wird mit $\mathcal{M}$ bezeichnet. Außerdem wird das eingeschränkte Zustandsintegral eingeführt (vgl. Gl. (5.4)):

$$\tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}}) = \int \mathcal{D}\phi \delta(\vec{\mathcal{M}} - M\vec{\phi}) e^{-S\{\vec{\phi};j,\omega\}}. \quad (5.38)$$

Aufgrund der $O(N)$ -Symmetrie ist das eingeschränkte Zustandsintegral $\tilde{Z}(\mathcal{M}) = \tilde{Z}(j=0, \vec{\mathcal{M}})$ von der Richtung der Magnetisierung unabhängig. Das eingeschränkte effektive Potential $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ wird – bis auf eine Normierungskonstante – über

$$\tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}}) = \exp \left(-V\mathcal{U}(\mathcal{M}) + Vj\mathcal{M}_N \right) \quad (5.39)$$

(implizit) definiert (vgl. Gl. (5.4)). Das eingeschränkte effektive Potential $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ ist zusätzlich volumenabhängig, auch wenn dies nicht explizit indiziert wird.

Da die Abhängigkeit von der Richtung $\vec{\mathcal{M}}/\mathcal{M}$ nur im Quellterm $\exp(Vj\mathcal{M}_N)$ vorkommt, kann die Winkelintegration in Gl. (5.36) ausgeführt werden (vgl. Gl. (5.5)):

$$Z(j) = 2\pi^{\frac{N}{2}} \int_0^\infty d\mathcal{M} \mathcal{M}^{N-1} Y_N(Vj\mathcal{M}) e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M})}. \quad (5.40)$$

Die Funktionen Y_N sind in Gl. (4.29) definiert worden.

Als nächstes gilt es, den Zusammenhang zwischen den Observablen, die aus dem dem Zustandsintegral $Z(j)$ über Ableitungen nach der äußeren Quelle j gewonnen werden können, und den effektiven Observablen, die über das eingeschränkte Zustandsintegral $\tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}})$ definiert werden, herauszustellen.

5.3.2 Effektive Observable und eingeschränkte Korrelationsfunktionen

Damit die Erwartungswerte $\langle \mathcal{Q} \rangle_j$ von Observablen der fundamentalen Theorie identisch mit den Erwartungswerten der effektiven Theorie sind, ist folgende Definition effektiver Observabler erforderlich:

$$\mathcal{Q}_{eff}(\vec{\mathcal{M}}) e^{-VU(\mathcal{M})} = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{Q}(\vec{\phi}) \delta(\vec{\mathcal{M}} - M\vec{\phi}) e^{-S\{\vec{\phi}; j=0, \omega\}}. \quad (5.41)$$

Die effektiven Observablen sind Funktionalintegrale bei festgehaltenem Wert der Magnetisierung und werden deswegen in der folgenden Weise abgekürzt:

$$\mathcal{Q}_{eff}(\vec{\mathcal{M}}) = \langle \mathcal{Q}(\vec{\phi}) \rangle_{\vec{\mathcal{M}}} \quad (5.42)$$

Die Erwartungswerte der Observablen bei endlichem äußeren Strom j lassen sich dann als gewöhnliche Integrale schreiben:

$$\langle \mathcal{Q} \rangle_j = \frac{1}{Z(j)} \int d^N \mathcal{M} \tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}}) \langle \mathcal{Q}(\vec{\phi}) \rangle_{\vec{\mathcal{M}}}. \quad (5.43)$$

Dieser Formalismus wird nun sowohl auf die „einfachen“ Observablen, wie z.B. die Magnetisierung, als auch 2-Punktfunktionen angewendet. Beispielsweise sind wir an den Korrelationsfunktionen des projizierten Feldes

$$\phi_{\parallel}(x) = \frac{\sum_{\alpha} \phi^{\alpha}(x) \mathcal{M}_{\alpha}}{\mathcal{M}}, \quad (5.44)$$

und der transversalen Felder

$$\phi_{\perp}^{\alpha}(x) = \phi^{\alpha}(x) - \phi_{\parallel}(x) \frac{\mathcal{M}_{\alpha}}{\mathcal{M}} \quad (5.45)$$

interessiert. Näherungsweise können $\phi_{\parallel}(x)$ als das σ -Feld und $\phi_{\perp}^{\alpha}(x)$ als die Felder der Goldstone-Bosonen betrachtet werden, obgleich die Korrelationsfunktionen von $\phi_{\parallel}$ – wie z.B. mit Hilfe der Störungstheorie gezeigt werden kann – auch nichtführende Korrekturen von den Goldstone-Bosonen enthalten. Ähnliches gilt natürlich auch für die Interpretation von $\phi_{\perp}^{\alpha}$. Eine bemerkenswerte Eigenschaft der Felder $\phi_{\parallel}(x)$ und $\phi_{\perp}^{\alpha}(x)$ ist ihre Nicht-Lokalität: Über die Magnetisierung $\vec{\mathcal{M}}$ hängen sie von der gesamten Feldkonfiguration ab.

Desweiteren werden eingeschränkte Korrelationsfunktionen $\langle \phi^{\alpha}(x) \phi^{\beta}(y) \rangle_{\vec{\mathcal{M}}}$ durch das folgende Funktionalintegral bei $j=0$ definiert [75,124] (s. Gleichungen (5.41) und (5.42)):

$$\langle \phi^{\alpha}(x) \phi^{\beta}(y) \rangle_{\vec{\mathcal{M}}} = \frac{1}{\tilde{Z}(\mathcal{M})} \int \mathcal{D}\phi \phi^{\alpha}(x) \phi^{\beta}(y) \delta(\vec{\mathcal{M}} - M\vec{\phi}) e^{-S\{\vec{\phi}; j=0, \omega\}}. \quad (5.46)$$

Aufgrund der $O(N)$ -Symmetrie der Wirkung bei $j=0$ können diese Korrelationsfunktionen in einen parallelen und einen transversalen Anteil zerlegt werden:

$$\langle \phi^{\alpha}(x) \phi^{\beta}(y) \rangle_{\vec{\mathcal{M}}} = \frac{\mathcal{M}_{\alpha} \mathcal{M}_{\beta}}{\mathcal{M}^2} \tilde{G}_{\parallel}(x-y, \mathcal{M}) + \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{\mathcal{M}_{\alpha} \mathcal{M}_{\beta}}{\mathcal{M}^2} \right) \tilde{G}_{\perp}(x-y, \mathcal{M}). \quad (5.47)$$

Mit Hilfe der eingeschränkten Korrelationsfunktionen lassen sich die 2-Punktfunktionen des Feldes $\vec{\phi}(x)$ bei endlichem Wert der äußeren Quelle j in der folgenden Form schreiben:

$$\langle \phi^\alpha(x) \phi^\beta(y) \rangle_j = \frac{1}{Z(j)} \int d^N \mathcal{M} \tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}}) \langle \phi^\alpha(x) \phi^\beta(y) \rangle_{\vec{\mathcal{M}}} . \quad (5.48)$$

Die 2-Punktfunktionen des longitudinalen Feldes $\phi_{\parallel}$ und der transversalen Felder $\phi_{\perp}^{\alpha}$ werden unter Verwendung von $\tilde{G}_{\parallel}$ und $\tilde{G}_{\perp}$ ausgedrückt:

$$\langle \phi_{\parallel}(x) \phi_{\parallel}(y) \rangle_j = \frac{1}{Z(j)} \int d^N \mathcal{M} \tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}}) \tilde{G}_{\parallel}(x - y, \mathcal{M}) , \quad (5.49)$$

$$\langle \phi_{\perp}^{\alpha}(x) \phi_{\perp}^{\beta}(y) \rangle_j = \frac{1}{Z(j)} \int d^N \mathcal{M} \tilde{Z}(j, \vec{\mathcal{M}}) \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{\mathcal{M}_{\alpha} \mathcal{M}_{\beta}}{\mathcal{M}^2} \right) \tilde{G}_{\perp}(x - y, \mathcal{M}) .$$

Wird abschließend noch die Winkelintegration ausgeführt, so erhalten wir:

$$\langle \phi_{\parallel}(x) \phi_{\parallel}(y) \rangle_j = \frac{2\pi^{N/2}}{Z(j)} \int_0^{\infty} d\mathcal{M} \mathcal{M}^{N-1} Y_N(Vj\mathcal{M}) \cdot e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M})} \tilde{G}_{\parallel}(x - y, \mathcal{M}) , \quad (5.50)$$

$$\langle \phi_{\perp}^{\alpha}(x) \phi_{\perp}^{\beta}(y) \rangle_j = 0 \quad \text{für } \alpha \neq \beta , \quad (5.51)$$

$$\langle \phi_{\perp}^{\alpha}(x) \phi_{\perp}^{\alpha}(y) \rangle_j = \frac{2\pi^{N/2}}{Z(j)} \int_0^{\infty} d\mathcal{M} \mathcal{M}^{N-1} \frac{(N-2)Y_N(Vj\mathcal{M}) + Y_N''(Vj\mathcal{M})}{N-1} \cdot e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M})} \tilde{G}_{\perp}(x - y, \mathcal{M}) , \quad \text{für } \alpha = 1, \dots, N-1, \quad (5.52)$$

$$\langle \phi_{\perp}^N(x) \phi_{\perp}^N(y) \rangle_j = \frac{2\pi^{N/2}}{Z(j)} \int_0^{\infty} d\mathcal{M} \mathcal{M}^{N-1} [Y_N(Vj\mathcal{M}) - Y_N''(Vj\mathcal{M})] \cdot e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M})} \tilde{G}_{\perp}(x - y, \mathcal{M}) . \quad (5.53)$$

Damit können die untersuchten Erwartungswerte sowie die Korrelationsfunktionen des parallelen und der transversalen Felder durch gewöhnliche Integrale über eingeschränkte Korrelationsfunktionen und das eingeschränkte effektive Potential ausgedrückt werden.

5.3.3 Sattelpunktentwicklung des effektiven Potentials

Ist das eingeschränkte effektive Potential $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ (z.B. aus störungstheoretischen Rechnungen) bekannt, so kann $Z(j)$ im Limes $V \rightarrow \infty$ durch eine Sattelpunktentwicklung um das Minimum $\mathcal{M}_0$ von $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ approximiert werden. Die Erwartungswerte und höhere Momente lassen sich wie gewöhnlich über Ableitungen des Zustandsintegrals nach der äußeren Quelle j gewinnen.

Im Anhang B wird die Sattelpunkt-Approximation am Beispiel des Integrals

$$A_q = 2\pi^{\frac{N}{2}} \int_0^{\infty} d\mathcal{M} \mathcal{M}^q Y_N(Vj\mathcal{M}) e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M})} \quad (5.54)$$

ausführlicher diskutiert. Mit dieser Abkürzung ist das Zustandsintegral einfach $Z(j) = A_{N-1}$. Das Ergebnis der Sattelpunktentwicklung aus Anhang B für A_q hat im Limes $V \rightarrow \infty$ bei festem Vj folgende Gestalt:

$$\begin{aligned}
 A_q &= 2\pi^{\frac{N}{2}} e^{-V\mathcal{U}(\mathcal{M}_0)} \left(b_0(x, q) \sqrt{\frac{2\pi}{V}} + b_2(x, q) \sqrt{\frac{2\pi}{V^3}} + \dots \right)_{x=Vj\mathcal{M}_0}, \\
 b_0(x, q) &= \mathcal{M}_0^q Y_N(x) a_1, \\
 b_2(x, q) &= \mathcal{M}_0^{q-2} \left\{ \left[q(q-1) \frac{a_1^3}{2} + 3qa_1a_2\mathcal{M}_0 + 3a_3\mathcal{M}_0^2 \right] Y_N(x) \right. \\
 &\quad \left. + \left[3a_1a_2\mathcal{M}_0 + qa_1^3 \right] xY'_N(x) + \frac{a_1^3}{2} x^2 Y''_N(x) \right\}.
 \end{aligned} \tag{5.55}$$

Die Koeffizienten a_i hängen nur vom effektiven Potential $\mathcal{U}(\mathcal{M})$ und seinen Ableitungen am Minimum $\mathcal{M}_0$ ab. Sie werden in Anhang B für $i = 1, 2, 3$ berechnet. Hier benötigen wir allerdings nur a_1 und a_2 :

$$a_1 = (\mathcal{U}''(\mathcal{M}_0))^{-1/2}, \quad a_2 = -\frac{1}{6} \frac{\mathcal{U}^{(3)}(\mathcal{M}_0)}{(\mathcal{U}''(\mathcal{M}_0))^2}. \tag{5.56}$$

Mit der Kenntnis des Zustandsintegrals in der Sattelpunktentwicklung kann man nun z.B. den Erwartungswert des Feldes ϕ^N

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{M}_N \rangle_{j,V} &= \left\langle \frac{1}{V} \sum_x \phi^N(x) \right\rangle_{j,V} = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial j} \ln Z(j) \\
 &= \frac{x}{jV} \left\{ \frac{1}{b_0(x, N-1)} \frac{\partial}{\partial x} b_0(x, N-1) + \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{b_2(x, N-1)}{b_0(x, N-1)} \right) \right\}_{x=Vj\mathcal{M}_0} \\
 &= \frac{1}{jV} \left(\frac{uY'_N(u)}{Y_N(u)} \right) + ja_1^2, \\
 u &= Vj\mathcal{M}_0 \left[1 + \frac{1}{V\mathcal{M}_0^2} \left(3a_2\mathcal{M}_0 + \frac{N-1}{2} a_1^2 \right) \right],
 \end{aligned} \tag{5.57}$$

und den Erwartungswert der k -ten Potenz von $\mathcal{M}$ berechnen:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{M}^k \rangle_{j,V} &= \left\langle \left| \frac{1}{V} \sum_x \vec{\phi}(x) \right|^k \right\rangle_{j,V} = \frac{A_{N+k-1}}{A_{N-1}} \\
 &= \mathcal{M}_0^k \left\{ 1 + \frac{1}{V} \left(\frac{b_2(x, N+k-1)}{b_0(x, N+k-1)} - \frac{b_2(x, N-1)}{b_0(x, N-1)} \right) \right\}_{x=Vj\mathcal{M}_0} \\
 &= \mathcal{M}_0^k \left\{ 1 + \frac{k}{V\mathcal{M}_0^2} \left[3a_2\mathcal{M}_0 + \frac{(2N+k-3)}{2} a_1^2 + \frac{xY'_N(x)}{Y_N(x)} \right]_{x=Vj\mathcal{M}_0} a_1^2 \right\}.
 \end{aligned} \tag{5.58}$$

Der letzte j -abhängige Term in der letzten Gleichung verschwindet im Grenzfall $j \rightarrow 0$.

In sehr einfacher Weise läßt sich die Suszeptibilität χ , die zur Breite der Verteilung der Magnetisierung proportional ist, durch die zweite Ableitung des eingeschränkten effektiven Potentials am Minimum beschreiben

$$\chi = V \left[\langle \mathcal{M}^2 \rangle_{j,V} - \left(\langle \mathcal{M} \rangle_{j,V} \right)^2 \right] = a_1^2 = \left(\mathcal{U}''(\mathcal{M}_0) \right)^{-1}. \quad (5.59)$$

Bemerkenswert ist, daß χ in der hier betrachteten Ordnung nicht von der äußeren Quelle j abhängt. Dies bestätigt sich in den numerischen Messungen.

Für die Korrelationsfunktionen des projizierten Feldes $\phi_{\parallel}(x)$ und des transversalen Feldes $\phi_{\perp}^{\alpha}(x)$ bei $j = 0$ liefert die Sattelpunkt-Approximation in niedrigster Ordnung

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\parallel}(x) \phi_{\parallel}(y) \rangle_{j=0} &= \tilde{G}_{\parallel}(x-y, \mathcal{M}_0), \\ \langle \phi_{\perp}^{\alpha}(x) \phi_{\perp}^{\beta}(y) \rangle_{j=0} &= \delta_{\alpha\beta} \frac{N-1}{N} \tilde{G}_{\perp}(x-y, \mathcal{M}_0). \end{aligned} \quad (5.60)$$

Mit Hilfe der Sattelpunkt-Methode sind alle interessierenden Größen durch das eingeschränkte effektive Potential $\mathcal{U}(\mathcal{M})$, sein Minimum $\mathcal{M}_0$ und seine Ableitungen $\mathcal{U}''(\mathcal{M}_0)$, $\mathcal{U}^{(3)}(\mathcal{M}_0)$ bzw. die eingeschränkten Korrelationsfunktionen am Minimum gegeben. Im nächsten Abschnitt gilt es, diese Größen störungstheoretisch in der 1-Schleifen Näherung zu berechnen.

5.3.4 1-Schleifen remormierte Störungstheorie

Die 1-Schleifen Näherung der Störungstheorie wird für endliches Volumen in der Gitterregularisierung mit der Standard-Wirkung ($\omega = 0$) durchgeführt. Die Ergebnisse für die „verbesserte“ Wirkung werden durch die Ersetzung

$$\hat{p}^2 \rightarrow \hat{p}^2 + \omega \widehat{2p^2} \quad (5.61)$$

erhalten.

Die 1-Schleifen Störungstheorie liefert für das eingeschränkte effektive Potential

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(\mathcal{M}) &= -\frac{m_0^2}{2} \mathcal{M}^2 + \frac{g_0}{4!} \mathcal{M}^4 + \frac{1}{2V} \sum'_{p \in \left(\frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}_L\right)^d} \ln \left(\hat{p}^2 - m_0^2 + \frac{g_0}{2} \mathcal{M}^2 \right) \\ &\quad + \frac{N-1}{2V} \sum'_{p \in \left(\frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}_L\right)^d} \ln \left(\hat{p}^2 - m_0^2 + \frac{g_0}{6} \mathcal{M}^2 \right) \end{aligned} \quad (5.62)$$

Der Strich an der Summe indiziert, daß der Impuls $p = 0$ in der Summation ausgelassen wird. Über die erste Ableitung des Potentials erhält man folgenden Ausdruck für das Minimum $\mathcal{M}_0$:

$$\mathcal{M}_0 = \sqrt{\frac{6m_0^2}{g_0}} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{g_0}{6m_0^2} \bar{G}_1(2m_0^2) - \frac{N-1}{2} \frac{g_0}{6m_0^2} \bar{G}_1(0) + \mathcal{O}(g_0^2) \right). \quad (5.63)$$

Dabei wurde die Impulssumme

$$\bar{G}_r(m^2) = \frac{1}{L^d} \sum'_{p \in (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}_L)^d} (\hat{p}^2 + m^2)^{-r} \quad (5.64)$$

eingeführt.

Mit Hilfe der zweiten und dritten Ableitung des effektiven Potentials können wir die Größen

$$\begin{aligned} \chi = a_1^2 &= (\mathcal{U}''(\mathcal{M}_0))^{-1} \\ &= \frac{3}{g_0 \mathcal{M}_0^2} \left\{ 1 + \frac{g_0}{6} (9 \bar{G}_2(2m_0^2) + (N-1) \bar{G}_2(0)) + \mathcal{O}(g_0^2) \right\}, \end{aligned} \quad (5.65)$$

$$\begin{aligned} 3a_2 \mathcal{M}_0 &= -\frac{1}{2} \frac{\mathcal{M}_0 \mathcal{U}^{(3)}(\mathcal{M}_0)}{(\mathcal{U}''(\mathcal{M}_0))^2} \\ &= -\frac{3}{2} a_1^2 - \frac{g_0}{6} (27 \bar{G}_3(2m_0^2) + (N-1) \bar{G}_3(0)) + \mathcal{O}(g_0^2), \end{aligned} \quad (5.66)$$

berechnen, die für die Bestimmung der Erwartungswerte (5.57) und (5.58) benötigt werden.

Die störungstheoretische Rechnung für die Korrelationsfunktion des longitudinalen Feldes ergibt – in Kombination mit der niedrigsten Ordnung der Sattelpunktentwicklung:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\parallel}(x) \phi_{\parallel}(0) \rangle_{j=0} &= \mathcal{M}_0^2 + G(2m_0^2, x) \\ &\quad - \frac{g_0}{3} (3G(2m_0^2, 0) + (N-1)G(0, 0)) \frac{\partial}{\partial m^2} G(m^2, x) \Big|_{m^2=2m_0^2} \\ &\quad + m_0^2 \frac{g_0}{3} \sum_{x', y'} G(2m_0^2, x - x') G(2m_0^2, y') \\ &\quad \times (9 G(2m_0^2, x' - y')^2 + (N-1) G(0, x' - y')^2) + \mathcal{O}(g_0^2), \end{aligned} \quad (5.67)$$

wobei die freie 2-Punktfunktion

$$G(m^2, x) = \frac{1}{L^d} \sum'_{p \in (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}_L)^d} \frac{e^{ipx}}{\hat{p}^2 + m^2}. \quad (5.68)$$

eingeführt worden ist. All diese perturbativen Beziehungen erfordern natürlich Renormierung. Die Renormierungsbedingungen werden im folgenden Abschnitt angegeben.

5.3.5 Renormierung

Weil die numerischen Simulationen ausschließlich in vier Raum-Zeit-Dimensionen durchgeführt wurden, beschränken wir uns im folgenden Abschnitt auf $d=4$ Dimensionen. Eine Verallgemeinerung der entsprechenden Formeln auf den 3dimensionalen

Fall ist sicher möglich, jedoch sollte zunächst die Anwendbarkeit geprüft werden, da die Φ^4 -Theorie in drei Dimensionen nicht trivial ist.

Die Renormierungskonstanten werden für verschwindende äußere Quelle j auf unendlichem Gitter für die Standard-Wirkung mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung berechnet, d.h. es werden dieselben Renormierungsbedingungen gestellt, die auch Lüscher und Weisz [32] angewendet haben: Die nackten Vertexfunktionen sind in folgender Weise normiert:

$$(2\kappa)^{-1} \frac{\partial}{\partial p^2} \left\{ \Gamma^{(2,0)}(p, -p)_{ab} \right\}_{p=0} = -\delta_{ab} Z^{-1}, \quad (5.69)$$

$$Re \left\{ \Gamma^{(2,0)}(p, -p)_{NN} \right\}_{p=\bar{p}} = 0. \quad (5.70)$$

Subtraktionspunkt in der letzten Renormierungsbedingung ist $\bar{p} = (im_R - \epsilon, 0, 0, 0)$, ($\epsilon > 0$ infinitesimal). Er kann wegen der Infrarot-Divergenzen für $N > 1$ nicht bei $p=0$ gewählt werden.

In dieser Konvention ergibt sich für die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z der Goldstone-Bosonen:

$$Z = 1 + \frac{2}{3} g_0 m_0^2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{\hat{p}^2} \left[-\frac{\cos p_1}{(\hat{p}^2 + 2m_0^2)^2} + 4 \frac{\sin^2 p_1}{(\hat{p}^2 + 2m_0^2)^3} \right] + \mathcal{O}(g_0^2). \quad (5.71)$$

Für die renormierte σ -Masse erhält man

$$m_R = \text{arcosh} \left(1 + m_0^2 \right) - \frac{g_0}{12m_0 \sqrt{2 + m_0^2}} Re \left[6J_1(2m_0^2) + 2(N-1)J_1(0) \right. \\ \left. + 2m_0^2 \left(9\hat{I}_2(2m_0^2, p) + (N-1)\hat{I}_2(0, p) \right) \right]_{p=\bar{p}} + \mathcal{O}(g_0^2), \quad (5.72)$$

$$\bar{p} = (0, 0, 0, i \text{arcosh}(1 + m_0^2) - \epsilon) \quad (5.73)$$

wobei die Gitterintegrale

$$J_1(m^2) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{\hat{p}^2 + m^2}, \quad (5.74)$$

$$\hat{I}_2(m^2, p) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{1}{(\hat{q}^2 + m^2) ((p-q)^2 + m^2)} \quad (5.75)$$

eingeführt worden sind und $\epsilon > 0$ wieder als infinitesimal betrachtet wird.

Die renormierte σ -Masse m_R , wie sie von Lüscher und Weisz [32] eingeführt worden ist, stimmt bis auf Korrekturen höherer Schleifen-Ordnung mit der physikalischen Masse m_σ überein. Die Masse m_σ und die Breite Γ_σ des σ -Teilchens sind durch die Position des Poles im zweiten Blatt des analytisch fortgesetzten σ -Propagators definiert:

$$\Gamma^{(2,0)}(p, -p)_{NN} \big|_{p=(im_\sigma + \Gamma_\sigma/2, 0, 0, 0)} = 0. \quad (5.76)$$

Die renormierte und die *nackte* Masse sind hingegen schon auf Baumgraphen-Niveau aufgrund von skalenverletzenden Termen verschieden:

$$m_R = \text{arcosh}(1 + m_0^2). \quad (5.77)$$

Entsprechendes gilt folglich auch für die renormierte Kopplung, die (für verschwindenden äußeren Strom j) in folgender Weise definiert wird:

$$g_R = 3Z \frac{m_R^2}{\Sigma^2} = 3 \frac{m_R^2}{F^2}. \quad (5.78)$$

Dabei ist $\Sigma = \lim_{j \rightarrow 0} \langle \phi^N \rangle_j$ der Felderwartungswert für verschwindende äußere Quelle.

Die Resultate für das Minimum des eingeschränkten effektiven Potentials und die Suszeptibilität lauten, ausgedrückt durch renormierte Parameter:

$$\mathcal{M}_0 = \Sigma \left(1 + B_1(m_R L) \frac{Z}{\Sigma^2 L^2} + \mathcal{O}(g_R^2) \right), \quad (5.79)$$

$$\chi = \frac{1}{m_R^2} \frac{\Sigma^2}{\mathcal{M}_0^2} \left(1 + \frac{m_R^2 Z}{2\Sigma^2} B_2(m_R L) + \mathcal{O}(g_R^2) \right), \quad (5.80)$$

$$3a_2 \mathcal{M}_0 = -\frac{3}{2} \chi - \frac{m_R^2 Z}{2\Sigma^2} L^2 B_3(m_R L) + \mathcal{O}(g_R^2), \quad (5.81)$$

mit:

$$B_1(y) = \frac{N-1}{2} \beta_1 - \frac{3}{2} \bar{g}_1(y), \quad (5.82)$$

$$B_2(y) = (N-1)\beta_2 + 9\bar{g}_2(y) + \frac{1}{16\pi^2} (3\sqrt{3}\pi - N - 17 + 2(N-1)\ln y) \quad (5.83)$$

$$B_3(y) = -\frac{N-1}{2} \beta_3 + \frac{27}{2} \left(\bar{g}_3(y) + \frac{1}{16\pi^2 y^2} \right). \quad (5.84)$$

Die volumenabhängigen Korrekturen $\bar{g}_r$, die wir hier nur in $d=4$ Dimensionen verwenden, sind wie folgt definiert⁵:

$$\begin{aligned} \bar{g}_r(mL) &= \Gamma(r) L^{d-2r} \left\{ \frac{1}{L^d} \sum'_{p \in (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z})^d} (p^2 + m^2)^{-r} - \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} (p^2 + m^2)^{-r} \right\} \\ &= \left\{ \sum'_{n \in \mathbb{Z}^d} ((2\pi n)^2 + y^2)^{-r} - \int \frac{d^d z}{(2\pi)^d} (z^2 + y^2)^{-r} \right\}_{y=mL}. \end{aligned} \quad (5.85)$$

Die Funktionen $\bar{g}_r(mL)$, die ausführlich in Anhang C diskutiert werden, sind in den Abbildungen C.1 und C.2 für $r=1, 2, 3$ dargestellt. Sie werden im übrigen durch Ableitung der uns im vergangenen Abschnitt 5.2 begegneten Funktion $\bar{g}_0(y)$ erhalten. Die Funktionen $B_r(y)$ werden in den Abbildungen 5.4 und 5.5 für $r=1, 2, 3$ gezeigt.

⁵ Anders als in [124] wurde hier zusätzlich ein Faktor $\Gamma(r)$ in die Definition aufgenommen. Dadurch wird die allgemeine Entwicklung für kleine Argumente mL einfacher (s. Anhang C).

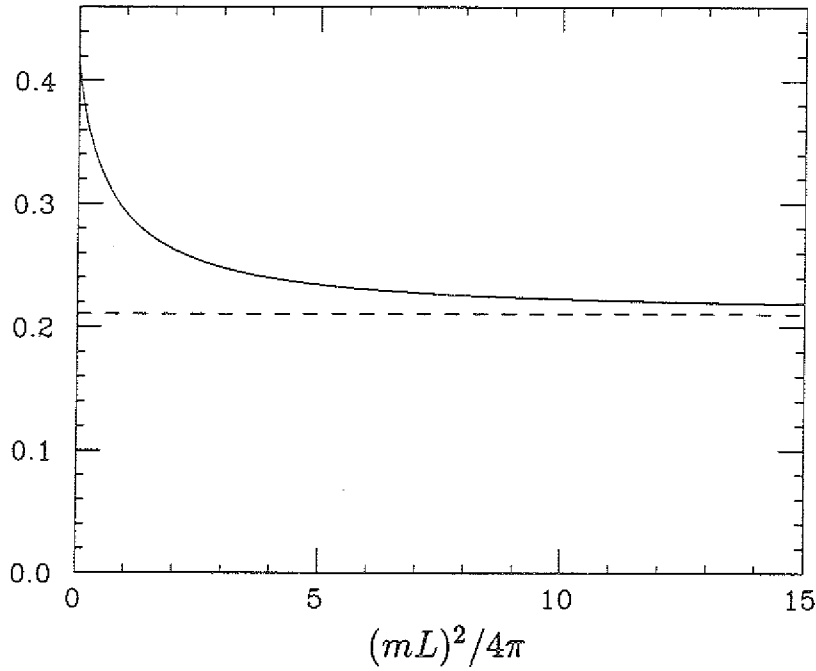
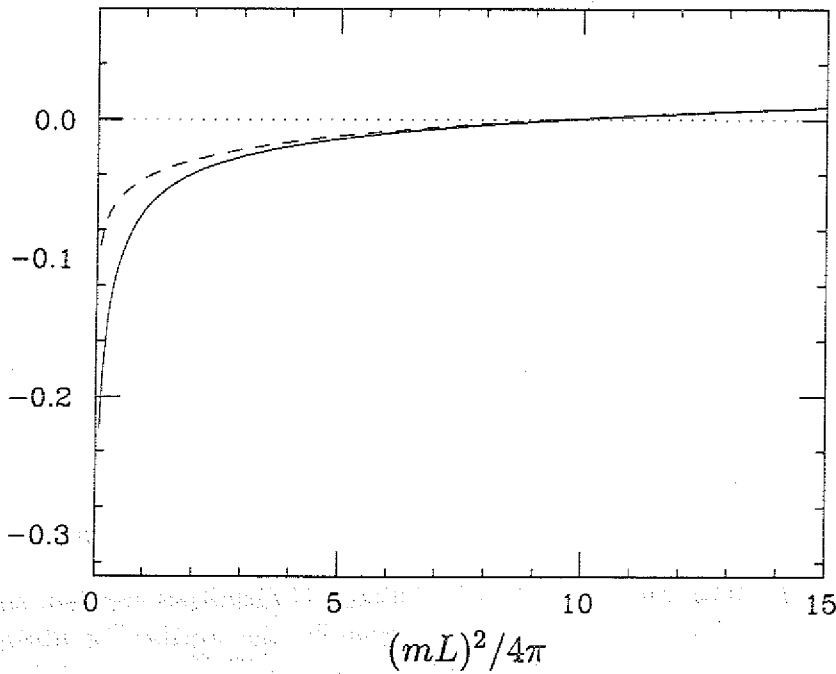
$B_1(mL)$  $B_2(mL)$ 

Abbildung 5.4: Die Funktionen $B_1(mL)$ und $B_2(mL)$, die in den Gleichungen (5.82) und (5.83) definiert werden, sind als durchgezogene Linien dargestellt. Gestrichelt ist jeweils der Grenzfall der chiralen Störungstheorie ($mL \rightarrow \infty$) eingezeichnet.

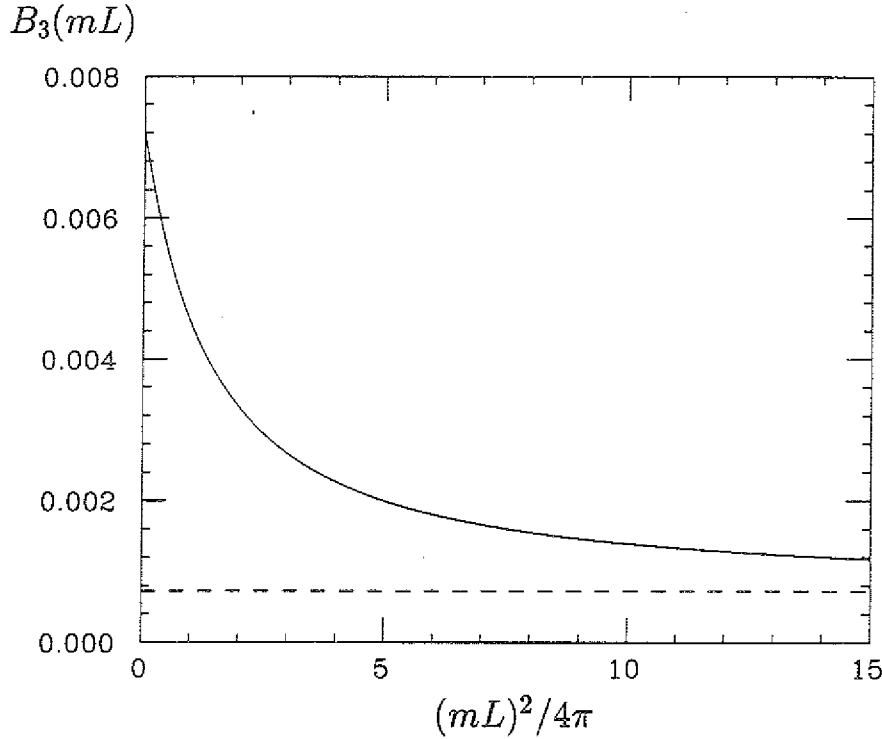


Abbildung 5.5: Die Funktion $B_3(mL)$, die in Gleichung (5.84) definiert wird, ist als durchgezogene Linien dargestellt. Gestrichelt ist der Grenzfall der chiralen Störungstheorie ($mL \rightarrow \infty$) eingezeichnet.

In den Abbildungen 5.4 und 5.5 wird auch der Übergang zu den Ergebnissen aus der chiralen Störungstheorie (gestrichelte Kurven) verdeutlicht.

Für eine endliche Gitterkonstante muß man lediglich p^2 durch $\hat{p}^2$ (im Fall der Standard-Wirkung) ersetzen. Dann ist p auf die Brillouin-Zone eingeschränkt. Folglich ist $\bar{g}_r$ nicht länger nur eine Funktion von mL , sondern man erhält verschiedene Kurven für unterschiedliche Werte von L . Der Kontinuum-Limes wird durchgeführt, indem $m \rightarrow 0$ und $L \rightarrow \infty$ geschickt werden, wobei mL festgehalten wird. Wie jedoch die Abbildungen C.1 und C.2 zeigen, sind sogar für das kleinste Gitter mit $L = 12$ Abweichungen kaum zu sehen. Demnach können Gittereffekte vernachlässigt werden und im folgenden wird für beide Gitter-Wirkungen nur der Kontinuum-Limes von $\bar{g}_r$ verwendet.

Die (engl. *shape*)-Koeffizienten β_r werden in [77] definiert. Für $r = 1, 2, 3$ ergibt sich

$$\beta_1 = 0.140461 \quad , \quad \beta_2 = -0.020305 \quad , \quad \beta_3 = -0.000482. \quad (5.86)$$

Auch sie unterliegen natürlich kleinen Korrekturen bei der Einführung einer endli-

chen Gitterkonstante. Für ein 12^4 - bzw. ein 20^4 -Gitter erhalten wir die entsprechenden Werte

$$\beta_1 = 0.139427 \quad , \quad \beta_2 = -0.020290 \quad , \quad \beta_3 = -0.000552 \quad (L = 12), \quad (5.87)$$

$$\beta_1 = 0.140103 \quad , \quad \beta_2 = -0.020301 \quad , \quad \beta_3 = -0.000511 \quad (L = 20), \quad (5.88)$$

die nur unwesentlich von den Kontinuumswerten abweichen.

Alle genannten Größen werden ausführlich in Anhang C diskutiert. Dort wird auch näher auf den Einfluß der Gittergeometrie („hyperkubisches“ oder „zylindrisches“ Volumen) eingegangen.

Das störungstheoretische Ergebnis für den inversen Propagator des longitudinalen Feldes im Impulsraum lautet ist bis auf $\mathcal{O}(g_R^2)$ -Korrekturen:

$$\begin{aligned} [G_{\parallel}(p, -p)]^{-1} = & p^2 + m_R^2 \left[1 + \frac{2Z}{\Sigma^2 L^2} B_1(m_R L) \right. \\ & \left. - \frac{m_R^2 Z}{2\Sigma^2} \left(B_2(m_R L) + 9S_2(m_R^2, p) + (N-1)S_2(0, p) \right) \right], \end{aligned} \quad (5.89)$$

Dabei haben wir die Fourier-Transformierte von

$$\langle \phi_{\parallel}(x) \phi_{\parallel}(y) \rangle_{j=0} = \frac{1}{L^4} \sum_{p \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^4} G_{\parallel}(p, -p) e^{ip(x-y)}. \quad (5.90)$$

eingeführt und verwenden die Abkürzung

$$S_2(m^2, p) = \frac{1}{L^4} \sum_{\substack{q \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^4 \\ q \neq 0, p}} \frac{1}{(q^2 + m^2)((p-q)^2 + m^2)} - \frac{1}{L^4} \sum_{\substack{q \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^4 \\ q \neq 0}} \frac{1}{(q^2 + m^2)^2}. \quad (5.91)$$

5.3.6 Chirale versus renormierte Störungstheorie

In der u -Entwicklung der chiralen Störungstheorie kann das führende Verhalten von χ im Grenzwert $L \rightarrow \infty$ durch den Skalenparameter Λ_{Σ} ausgedrückt werden (s. Gl. (5.34) für $d=4$) [73]:

$$\chi = \frac{N-1}{2} \frac{Z^2}{\Sigma^2} \left\{ \beta_2 + \frac{1}{8\pi^2} \ln(\Lambda_{\Sigma} L) \right\}. \quad (5.92)$$

Um dieses Ergebnis mit dem störungstheoretischen Resultat aus Gl. (5.80) vergleichen zu können, werden in der letzteren Formel alle diejenigen Terme vernachlässigt, die im Limes $L \rightarrow \infty$ ($m_R L \rightarrow \infty$) verschwinden. Auf diese Weise erhalten wir

$$\chi = \frac{1}{m_R^2} \left\{ 1 + \frac{g_R}{6} \left[\frac{3\pi\sqrt{3} - N - 17}{16\pi^2} + (N-1) \left(\beta_2 + \frac{\ln(m_R L)}{8\pi^2} \right) \right] + \mathcal{O}(g_R^2) \right\}. \quad (5.93)$$

Durch Gleichsetzung der beiden Gleichungen (5.92) und (5.93) ergibt sich

$$\ln \Lambda_\Sigma = \ln m_R + \frac{48\pi^2}{(N-1)g_R} + \frac{3\pi\sqrt{3} - N - 16}{2(N-1)} + \mathcal{O}(g_R), \quad (5.94)$$

wobei wir von

$$Z = 1 - \frac{1}{16\pi^2} \frac{g_R}{6} + \mathcal{O}(g_R^2) \quad (5.95)$$

Gebrauch gemacht haben. Diese Formel stimmt mit einer früheren Untersuchung überein [74]. Es sei jedoch explizit darauf hingewiesen, daß erst durch den Vergleich mit der der renormierten Störungstheorie der freie Parameter Λ_Σ in der chiralen Störungstheorie festgelegt wird. Auch Λ_M kann auf diese Weise durch Σ , Z und m_σ ausgedrückt werden [76, 69].

Was macht also den wesentlichen Unterschied zwischen dem störungstheoretischen Ausdruck (5.80) und dem Ergebnis (5.92) (mit (5.94)) aus der chiralen Störungstheorie bei der Beschreibung der Volumenabhängigkeiten von χ aus? Der entscheidende Term in Gleichung (5.80), der im Limes $m_R L \rightarrow \infty$ verschwindet, ist proportional zu $B_1(m_R L)/(m_R L)^2$. Für kleinere Werte von $m_R L$ ergibt deswegen das störungstheoretische Resultat (5.80) ein $1/L^2$ -Abfallverhalten von χ und nicht nur den logarithmischen Anstieg aus Gleichung (5.93), der erst für größere Werte von $m_R L$ dominiert (vgl. durchgezogene Kurve in Abb. 5.7).

5.4 Methoden zu Bestimmung von Σ , Z und m_σ

In diesem Abschnitt werden die Methoden erläutert, mit denen die Größen Σ , Z , und m_σ aus den Daten extrahiert werden. Es sei daran erinnert, daß diese Größen im unendlichen Volumen und für verschwindende äußere Quelle definiert sind.

Wie schon in Abschnitt 5.3.5 betont, können in der 1-Schleifen Näherung die renormierte Masse m_R und die physikalische σ -Masse m_σ identifiziert werden. Die Gittereffekte für die Volumenkorrekturen $\bar{g}_r(mL)$ sind so klein (s. Abbildungen C.1 und C.2), daß sie auch vernachlässigt werden können und mit der Kontinuum-Formulierung gearbeitet werden kann. Ein wesentlich Vorteil ist, daß somit für beide untersuchten Gitter-Regularisierungen die gleichen Korrekturen verwendet werden können.

Bevor die Formeln des letzten Abschnittes angewendet werden, müssen die Daten der Kontinuumsnormierung der Felder angepaßt werden. Das bedeutet in der Regel eine Multiplikation mit $\sqrt{2\kappa\sqrt{1+4\omega}}$.

5.4.1 Bestimmung von Z

Am effektivsten ist es, die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z über die Korrelationsfunktion des transversalen Feldes $\Phi_\perp^\alpha(x)$ zu bestimmen:

$$G_\perp(p, -p) = \frac{1}{V} \frac{1}{N-1} \left\langle \sum_\alpha \tilde{\Phi}_\perp^\alpha(p) \tilde{\Phi}_\perp^\alpha(-p) \right\rangle 2\kappa(1+4\omega), \quad (5.96)$$

$$\Phi_\perp^\alpha(x) = \frac{1}{V} \sum_{p \in (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}_L)^4} \tilde{\Phi}_\perp^\alpha(p) e^{ipx}. \quad (5.97)$$

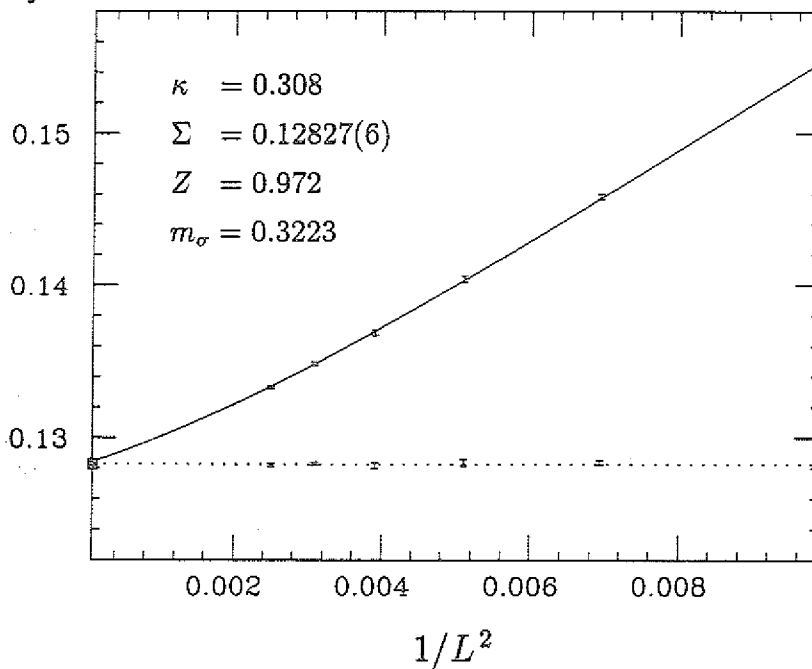
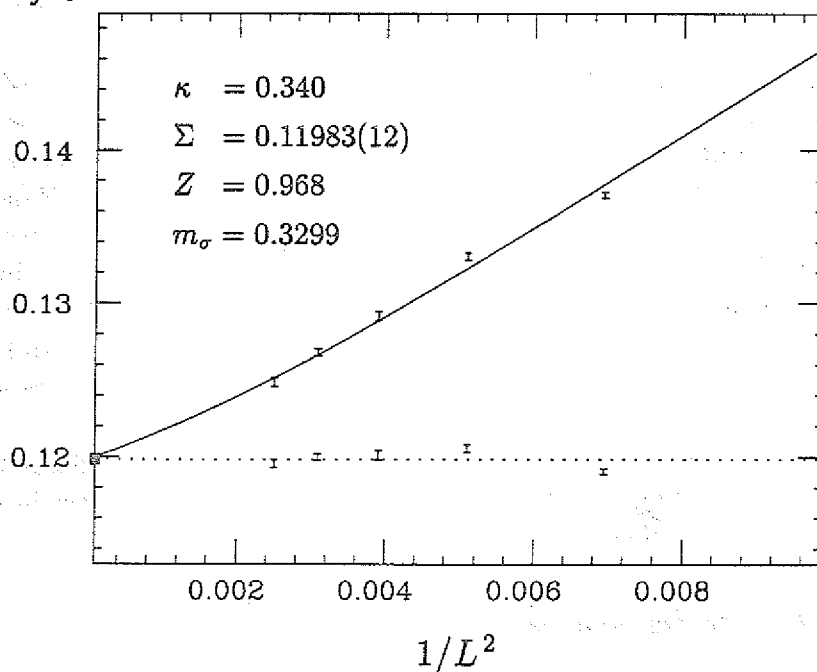
$\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$  $\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$ 

Abbildung 5.6: Die Magnetisierung $\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$ als Funktion von $1/L^2$ bei $\kappa = 0.308$ und $\kappa = 0.340$ für die Standard- bzw. die *verbesserte* Wirkung. Die durchgezogenen Linien zeigen die Fits mit Gl. (5.100) an die Daten. Der Schnittpunkt mit der Ordinatenachse im unendlichen Volumen liefert Σ , was durch die gepunktete Linie angedeutet ist. Werden die Volumenkorrekturen von den Datenpunkten abgezogen, so erhält man die Punkte, die um die Σ -Linie herum streuen.

Diese Korrelationsfunktion wird im Impulsraum für einige repräsentative Impulse gemessen und mit einem Ansatz für den freien Propagator gefittet:

$$[G_\perp(p, -p)]^{-1} = Z^{-1} \left\{ m_\pi^2(L) + \frac{1}{(1+4\omega)} (\hat{p}^2 + \omega \hat{2p}^2) \right\}. \quad (5.98)$$

Zur Erinnerung: $\omega = 0$ entspricht der Standard-Wirkung, $\omega = -\frac{1}{16}$ der verbesserten Wirkung (s. Gl. 3.19).

Werden zunächst beim Fit beide Parameter Z und m_π variabel gelassen, mißt man in der Tat mit Null verträgliche Werte der Massen m_π (denn $j = 0$), und zwar für alle untersuchten Gitter-Volumina. Dies impliziert, daß $G_\perp(p, -p)$ tatsächlich von den Goldstone-Bosonen dominiert ist. Die Endergebnisse werden allerdings aus 1-Parameter-Fits für Z bei festgehaltenem $m_\pi = 0$ genommen. Diese Werte stimmen innerhalb der statistischen Fehler mit den Werten aus dem 2-Parameter-Fit überein. Erwartungsgemäß wurde keine Volumenabhängigkeit von Z festgestellt.

5.4.2 Bestimmung von Σ

Der Felderwartungswert Σ im unendlichen Volumen wird auf zwei Arten bestimmt, die im Anschluß miteinander verglichen werden. Zum einen wird Σ aus dem Erwartungswert von $\mathcal{M}$ bei $j = 0$ gewonnen. Als weitere Möglichkeit wird Σ über den Erwartungswert $\mathcal{M}_N$ für nichtverschwindendes j gemessen. Diese Erwartungswerte $\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$ und $\langle \mathcal{M}_N \rangle_j$ werden mittels der in Abschnitt 4.3 diskutierten Histogramm-Methode aus der gemessenen Doppel-Verteilung der Magnetisierung und der Energie berechnet (s. Gl. (4.34) und (4.35)).

Der Zusammenhang von Σ mit der störungstheoretischen Entwicklung für das Minimum $\mathcal{M}_0$ des effektiven Potentials ist in Abschnitt 5.3.5 herausgearbeitet worden (s. Gl. (5.79)):

$$\mathcal{M}_0 = \Sigma \left(1 + B_1(m_\sigma L) \frac{Z}{\Sigma^2 L^2} \right). \quad (5.99)$$

Diese Beziehung geht zusammen mit den störungstheoretischen Ergebnissen (5.80) und (5.81) für die Suszeptibilität $\chi = a_1^2$ bzw. für $3a_2\mathcal{M}_0$ in die Sattelpunktentwicklungen aus Gleichungen (5.57) und (5.58) ein:

$$\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0} = \mathcal{M}_0 \left(1 + \frac{1}{V\mathcal{M}_0^2} ((N-1)\chi + 3a_2\mathcal{M}_0) \right), \quad (5.100)$$

$$\langle \mathcal{M}_N \rangle_j = \frac{1}{jV} \left(\frac{xY'_N(x)}{Y_N(x)} \right) + j\chi, \quad (5.101)$$

$$x = Vj\mathcal{M}_0 \left\{ 1 + \frac{1}{V\mathcal{M}_0^2} \left(\frac{N-1}{2}\chi + 3a_2\mathcal{M}_0 \right) \right\}.$$

Zur Erinnerung: innerhalb der hier erreichten Genauigkeit hängt χ nicht von j ab.

Um Σ entweder über Gl. (5.100) oder Gl. (5.101) messen zu können, benötigt man zuerst Z und m_σ . Die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z wird, wie in Abschnitt 5.4.1 diskutiert, aus der Korrelationsfunktion des transversalen Feldes bestimmt. Für die σ -Masse m_σ können entweder Werte eingesetzt werden, die mit

im folgenden Abschnitt 5.4.3 erörterten Methoden erhalten werden, oder wir können m_σ als freien Fit-Parameter behandeln. Die entsprechenden systematischen Abweichungen der Werte für Σ sind von der gleichen Größenordnung wie die statistischen Fehler. Überhaupt werden die Resultate von Σ kaum von Schwankungen der Masse m_σ beeinflusst, da diese erst in den 1-Schleifen-Korrekturen auftaucht.

Die Endergebnisse in den Tabellen 5.1 und 5.2 für Σ stammen aus einem Fit mit Hilfe der Beziehung (5.100), da in diesem Fall nicht erst zu endlichen Werten der äußeren Quelle j fortgesetzt werden muß. Ein Beispiel für einen solchen Fit zeigt Abbildung 5.6.

5.4.3 Bestimmung von m_σ

Wie im Falle des Felderwartungswertes Σ sind auch zur Berechnung der σ -Masse zwei unterschiedliche Methoden untersucht worden. Die erste Methode benutzt den Propagator des longitudinalen Feldes $\phi_{||}(x)$.

Dieser Propagator wird im Impulsraum mit einem ähnlichen Ansatz wie im Falle des transversalen Feldes gefittet:

$$\left[G_{||}(p, -p)\right]^{-1} = Z_\sigma^{-1} \left\{ m_\sigma^2(L) + \frac{1}{1+4\omega} (\hat{p}^2 + \omega \widehat{2p}^2) \right\}. \quad (5.102)$$

Die Volumenabhängigkeit der Masse $m_\sigma(L)$ wird mit Hilfe der Formel

$$Z_\sigma^{-1} m_\sigma^2(L) = m_\sigma^2 \left(1 + \frac{2Z}{\Sigma^2 L^2} B_1(m_\sigma L) - \frac{m_\sigma^2 Z}{2\Sigma^2} B_2(m_\sigma L) \right), \quad (5.103)$$

zu unendlichem Volumen extrapoliert. Diese Beziehung erhalten wir aus Gl. (5.89) im Grenzfall kleiner Impulse p .

Eine genauere Methode zur Bestimmung der σ -Masse m_σ bietet der Zugang über die Suszeptibilität⁶. Die numerischen Ergebnisse für χ , das aus den Verteilungen über die Breite des mittleren Feldes bestimmt wird, werden mit folgendem Ansatz (vergl. Gl. (5.80)) gefittet:

$$\chi = \frac{1}{m_\sigma^2} \left(1 - \frac{2Z}{\Sigma^2 L^2} B_1(m_\sigma L) \right) \left(1 + \frac{m_\sigma^2 Z}{2\Sigma^2} B_2(m_\sigma L) \right). \quad (5.104)$$

Dazu werden Z und Σ benötigt. Wie oben wird die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z aus dem Propagator-Fit genommen (s. Abschnitt 5.4.1).

Für den Felderwartungswert Σ können entweder Werte eingesetzt werden, die mit im Abschnitt 5.4.2 beschriebenen Methoden erhalten werden, oder wir können Σ als freien Fit-Parameter behandeln. Die entsprechenden systematischen Abweichungen der Werte für m_σ sind von der gleichen Größenordnung wie die statistischen Fehler.

⁶Später ist eine leistungsfähigere Unteroutine zur Berechnung des Impulsraum-Propagators programmiert worden (Idee von W. Bock), die zusammen mit der analytischen Fortsetzung dieser Größe in κ oder j zumindest gleich gute Ergebnisse für die σ -Masse liefert.

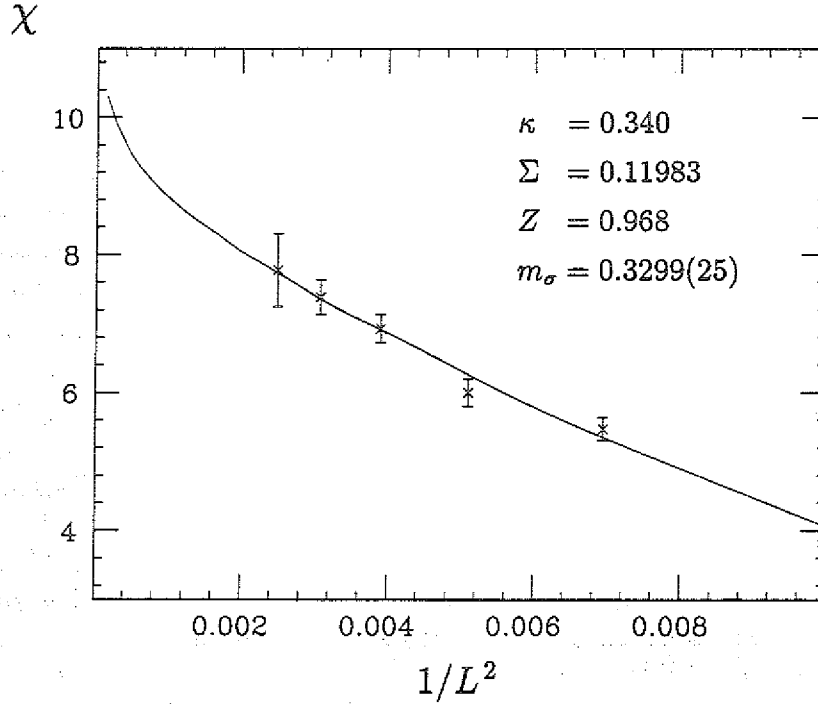
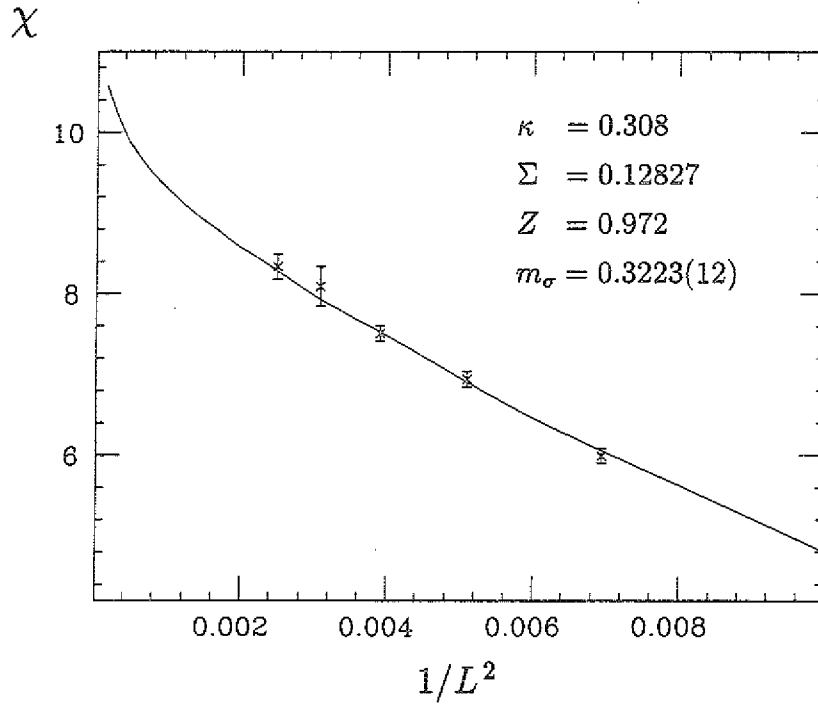


Abbildung 5.7: Die Suszeptibilität χ als Funktion von $1/L^2$ bei $\kappa = 0.308$ und $\kappa = 0.340$ für die Standard- bzw. die verbesserte Wirkung. Die durchgezogenen Linien zeigen Fits mit Gl. (5.104). Es wird deutlich, daß der $1/L^2$ Anteil dominiert.

Die Prozedur zur Berechnung von Σ aus der Magnetisierung und m_σ aus der Suszeptibilität wird iterativ (ca. 100-200 Mal) durchgeführt, bis die Ergebnisse stabil sind. Damit die Analyse der $\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$ und χ in sehr kurzer Rechenzeit (nur wenige Minuten) für ca. 100 κ -Werte iteriert werden kann, sind die Funktionen $B_r(y)$ direkt durch ein Chebyshev-Polynom approximiert worden. Beispiele, die die hohe Qualität dieser Fits veranschaulichen, sind in den Abbildungen 5.6 und 5.7 bei $\kappa=0.308$ für die Standard-Wirkung und bei $\kappa=0.340$ für die *verbesserte* Wirkung zu sehen.

5.4.4 Versagen der chiralen Störungstheorie

Sowohl die Daten für $\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$ als auch für $\langle \mathcal{M}_N \rangle_j$ wurden zusätzlich mit den Ansätzen (5.33) bzw. (5.27) aus der chiralen Störungstheorie analysiert:

$$\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0} = \Sigma \left(\rho_1 + \frac{N-1}{2V\Sigma^2} \chi \right), \quad (5.105)$$

$$\langle \mathcal{M}_N \rangle_j = \frac{1}{jV} \left(\frac{xY'_N(x)}{Y_N(x)} \right) + j\chi \quad \text{mit} \quad x = Vj\Sigma\rho_1. \quad (5.106)$$

Hier ist die Suszeptibilität aus Gleichung (5.34) einzusetzen:

$$\chi = 2\rho_2 \frac{Z^2}{\Sigma^2 L^{d-4}}. \quad (5.107)$$

Dazu werden die in den vorangehenden Abschnitten bestimmten Werte für Σ , Z und m_σ in die Beziehungen für die volumenabhängigen Parameter ρ_1 (5.15) bzw. ρ_2 (5.16) eingesetzt. Die Verknüpfung mit Λ_Σ und Λ_M (s. Gl. (5.94)) wird, wie in [76] beschrieben, ermittelt.

Die auf diese Weise erhaltenen gestrichelten (gepunkteten) Kurven in Abb. 5.8 verdeutlichen die Diskrepanz zwischen den Vorhersagen aus der chiralen Störungstheorie und den Daten. Eine Ursache ist leicht gefunden: Die Volumeneffekte durch die Vakuumpolarisationen des σ -Teilchens, die durch den Anteil $\tilde{g}_1(m_\sigma L)$ in der Funktion $B_1(m_\sigma L)$ (s. Abb. 5.4) beschrieben werden, sind für die untersuchten Werte von $m_\sigma L$ nicht exponentiell unterdrückt. Dies verdeutlichen die gepunkteten Linien auf der linken Seite in Abbildung 5.8, bei denen nur die niedrigste Ordnung der chiralen Störungstheorie berücksichtigt wird. Aber auch wenn in der nächsten Ordnung der chiralen Störungstheorie die Effekte des σ -Teilchens in Form der logarithmischen Skalen Λ_Σ und Λ_M mitberücksichtigt werden, sehen wir insbesondere bei Suszeptibilität χ (rechts in Abb. 5.8) deutliche Unterschiede. Wie schon in Abschn. 5.3.6 erwähnt dominiert für die hier untersuchten $m_\sigma L$ -Werte nicht ein logarithmischer Anstieg (für $V \rightarrow \infty$), sondern χ ist ebenfalls proportional zu $B_1(m_\sigma L) \sim 1/(m_\sigma L)^2$.

Betrachten wir die Bilderfolge in Abbildung 5.8 von oben nach unten, so sehen wir eine immer größere Übereinstimmung zwischen den mit Hilfe der renormierten und der chiralen Störungstheorie erhaltenen Ergebnissen, je weiter wir uns vom Phasenübergang entfernen. Es existiert also ein Bereich (bei σ -Massen $m_\sigma \geq 0.5$), in dem beide Methoden gemeinsam anwendbar sind [76, 124].

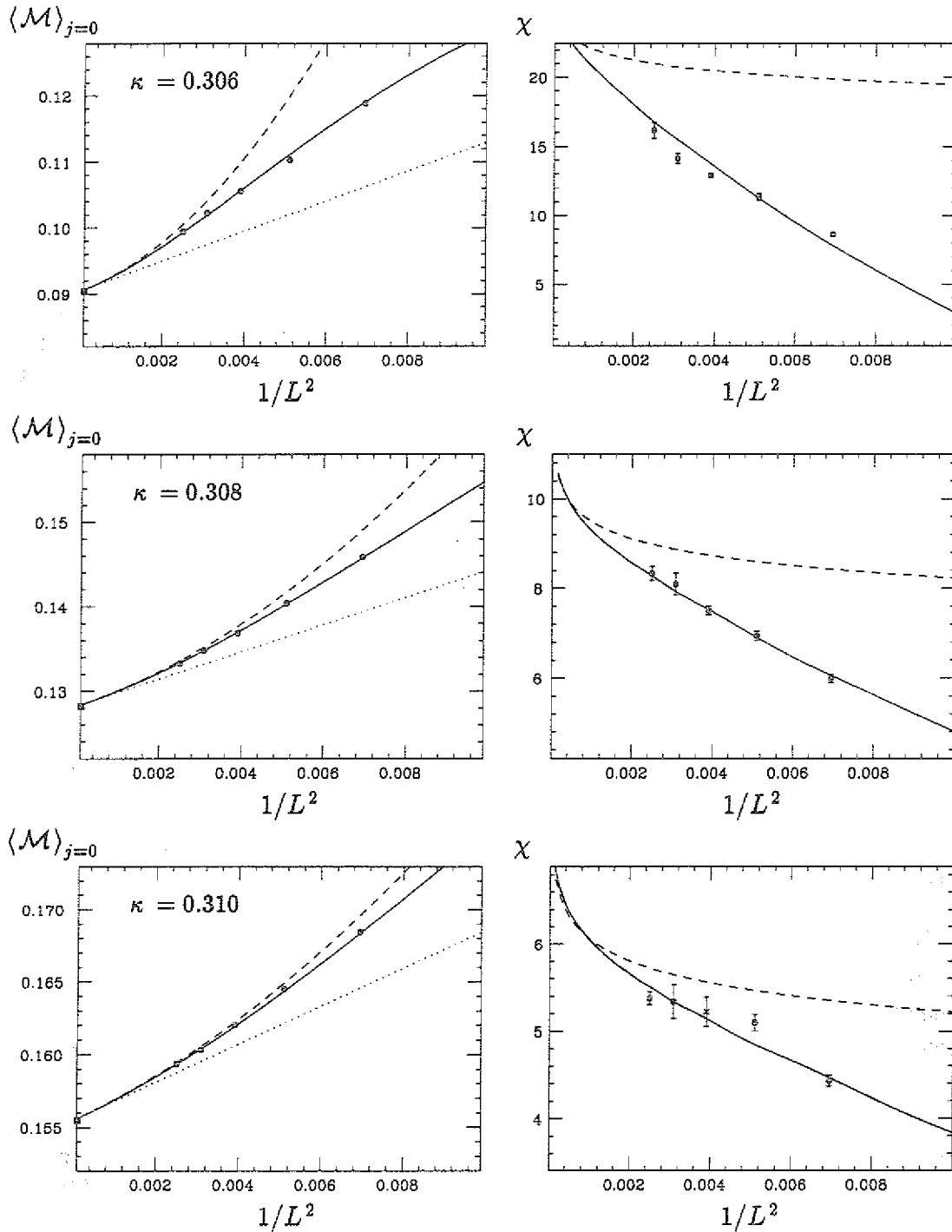


Abbildung 5.8: Der Vergleich zwischen renormierter und chiraler Störungstheorie im Fall der Standard-Wirkung bei $\kappa = 0.306$, $\kappa = 0.308$ und $\kappa = 0.310$. Aufgetragen sind die Magnetisierung $\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$ (links) und die Suszeptibilität χ (rechts) als Funktionen von $1/L^2$. Die durchgezogene Linien sind die Fits mit renormierter Störungstheorie, die zu den Ergebnissen in Tabelle 5.1 führen. Setzt man die Resultate für Σ , Z und m_σ in die Formel mit der zweiten Ordnung der chiralen Störungstheorie ein, so erhält man die gestrichelten Linien. Im Fall der Magnetisierung ist gepunktet auch noch zum Vergleich die erste Ordnung eingezeichnet.

5.4.5 Systematische Fehler aufgrund der Vernachlässigung höherer Schleifenordnungen

In allen benutzten störungstheoretischen Formeln haben wir uns auf die 1-Schleifen-Näherung beschränkt. Im folgenden wird diskutiert, wie der Einfluß der bisher vernachlässigten höheren Schleifen-Ordnungen quantifiziert werden kann.

Im Fall des Felderwartungswertes Σ können die Ergebnisse, die auf Fits mit den Gleichungen (5.100) und (5.101) basieren, miteinander verglichen werden. Die 2-Schleifen-Anteile sind für beide Gleichungen unterschiedlich, die Σ -Werte aus der 1-Schleifen-Näherung stimmen jedoch bis auf zwei Standardabweichungen überein. Dieser Sachverhalt kann dahingehend gedeutet werden, daß die 2-Schleifen-Näherung die Resultate für Σ um weniger als 0.2% ändern würde.

Außerdem bricht die Volumenentwicklung für konstant gehaltene Gittergrößen bei Annäherung an den kritischen Punkt zusammen, denn für immer kleinere Σ -Werte sind die Volumenentwicklungen nicht mehr eindeutig invertierbare Funktionen von Σ (der 1-Schleifen-Term ist dann von der Ordnung $\mathcal{O}(1)$). Diese Schranke ist bei den untersuchten Gittergrößen ungefähr bei einem Wert $\Sigma \lesssim 0.5$ erreicht.

Zur Abschätzung des Einflusses höherer Schleifen-Ordnungen auf m_σ ist die Form der störungstheoretischen Formel für χ variiert worden. Betrachten wir zunächst die Form (5.104), die letztendlich für den Fit an die Daten benutzt wurde. Die Verwendung des Ansatzes

$$\chi = \frac{1}{m_\sigma^2} \left(1 - \frac{2Z}{\Sigma^2 L^2} B_1(m_\sigma L) + \frac{m_\sigma^2 Z}{2\Sigma^2} B_2(m_\sigma L) \right) , \quad (5.108)$$

die auf dem 1-Schleifen-Niveau völlig äquivalent zu Gl. (5.104) ist, führt zu einer weniger befriedigenden Beschreibung der Volumenabhängigkeit von χ . Die Ergebnisse für m_σ würden sich jedoch lediglich um ca. 1.5% ändern (was im Bereich von 2 – 3 Standardabweichungen liegt).

Desweiteren stimmen die σ -Massen aus dem Fit an den Propagator der longitudinalen Felder (gemäß Gleichungen (5.102) und (5.103)) mit den Resultaten aus der Suszeptibilität gut überein. Die Abweichungen reichen von weniger als einer bis zu fünf Standardabweichungen, wobei die Übereinstimmung für die größeren κ -Werte zufriedenstellender ausfällt.

Insgesamt können wir also annehmen, daß die systematischen Unsicherheiten bei der Bestimmung von Σ und m_σ die statistischen Fehler nicht wesentlich übersteigen.

5.5 Numerische Ergebnisse zur Untersuchung der Volumenabhängigkeit

Die Tabellen 5.1 und 5.2 fassen die Ergebnisse für Z , m_σ und Σ zusammen, die mit den in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen Methoden für die Standard- bzw. die verbesserte Wirkung erhalten wurden. Die in diesen Tabellen angegebenen Fehler sind die rein statistischen Fehler aus dem χ^2 -Fit an die Daten.

Ein ausschlaggebender Grund für die hohe Präzision, mit der in dieser Arbeit die Volumeneffekte erklärt werden können, besteht darin, daß – im Vergleich zu beispielsweise [81] – die vollen Volumenkorrekturen $g_r(m_\sigma L)$ berücksichtigt worden sind und keine Näherungsformeln.

Aufgrund der kleinen antiferromagnetischen Kopplung bei der *verbesserten* Wirkung wäre eine Verringerung der Effizienz des Cluster-Algorithmus möglich. Vergleichen wir jedoch typische Fehler für Σ und m_σ in den Tabellen 5.1 und 5.2, so stellen wir fest, daß der Cluster-Algorithmus sowohl für die Standard als auch für die *verbesserte* Wirkung ausgezeichnet funktioniert.

κ	Σ	m_σ	Z
0.3056	0.08030(16)	0.1742(7)	
0.3058	0.08545(14)	0.1918(7)	
0.3060	0.09045(10)	0.2072(7)	0.977(3)
0.3062	0.09503(11)	0.2210(7)	
0.3064	0.09929(12)	0.2342(8)	
0.3066	0.10334(13)	0.2472(10)	
0.3068	0.10722(14)	0.2600(11)	
0.3070	0.11090(16)	0.2724(14)	
0.3072	0.11505(19)	0.2847(23)	
0.3074	0.11851(14)	0.2929(20)	
0.3076	0.12187(11)	0.3024(17)	
0.3078	0.12512(8)	0.3124(14)	
0.3080	0.12827(6)	0.3223(12)	0.972(3)
0.3082	0.13130(6)	0.3322(11)	
0.3084	0.13424(8)	0.3420(11)	
0.3086	0.13710(8)	0.3517(12)	
0.3088	0.13987(9)	0.3614(14)	
0.3090	0.14268(19)	0.3727(29)	
0.3094	0.14786(14)	0.3833(13)	
0.3096	0.15051(12)	0.3907(14)	
0.3098	0.15305(10)	0.3977(18)	
0.3100	0.15549(10)	0.4073(17)	0.964(7)

Tabelle 5.1: Ergebnisse für die Standard-Wirkung. Es sind nur statistische Fehler angegeben.

κ	Σ	m_σ	Z
0.33725	0.06980(43)	0.1696(53)	
0.33750	0.07668(43)	0.1813(31)	
0.33775	0.08333(38)	0.1985(25)	
0.33800	0.08887(31)	0.2184(30)	0.971(4)
0.33825	0.09363(32)	0.2322(27)	
0.33850	0.09805(37)	0.2496(31)	
0.33875	0.10212(40)	0.2739(37)	
0.33925	0.10927(27)	0.2960(47)	
0.33950	0.11295(19)	0.3065(38)	
0.33975	0.11647(15)	0.3179(30)	
0.34000	0.11983(12)	0.3299(25)	0.968(3)
0.34025	0.12311(10)	0.3413(24)	
0.34050	0.12636(9)	0.3523(25)	
0.34075	0.12941(12)	0.3656(29)	
0.34450	0.16644(12)	0.5186(35)	
0.34475	0.16831(7)	0.5231(31)	
0.34500	0.17037(7)	0.5291(27)	0.963(3)
0.34525	0.17246(9)	0.5364(25)	
0.34550	0.17446(9)	0.5449(24)	
0.34575	0.17638(10)	0.5529(26)	
0.34600	0.17827(12)	0.5605(29)	
0.34625	0.18015(15)	0.5694(33)	
0.34950	0.20286(8)	0.6611(52)	
0.34975	0.20450(7)	0.6655(45)	
0.35000	0.20612(6)	0.6724(38)	0.959(3)
0.35025	0.20769(6)	0.6819(37)	
0.35050	0.20924(7)	0.6895(40)	
0.35075	0.21076(8)	0.6968(44)	

Tabelle 5.2: Ergebnisse für die *verbesserte* Wirkung. Es sind nur statistische Fehler angegeben.

Kapitel 6

Untersuchung des Skalenverhaltens

In diesem Kapitel wird das Skalenverhalten der im vorangehenden Abschnitt gemessenen renormierten Größen m_σ und Σ untersucht und mit den Vorhersagen aus den (störungstheoretischen) Renormierungsgruppen-Gleichungen verglichen.

Wie schon in den vorangehenden Kapiteln häufig erwähnt, ist das Skalengebiet dadurch ausgezeichnet, daß physikalische Größen nur wenig vom Regularisierungsparameter, dem Gitterabstand a , abhängen (vgl. Gl. (3.16)). Das Verhalten der Theorie in der Umgebung des kritischen Punktes wird im Sinne der statistischen Physik im Rahmen von Renormierungsgruppen-Gleichungen beschrieben. Die störungstheoretische Entwicklung der in diesen partiellen Differentialgleichungen enthaltenen Renormierungsgruppen-Funktionen, führt zu den Skalengesetzen, die beispielsweise das Skalenverhalten der renormierten Masse m_R oder des Felderwartungswertes Σ beschreiben.

Die Genauigkeit der Resultate aus Kapitel 5 ist ausreichend, um die logarithmischen Korrekturen zu den Skalengesetzen der Molekularfeldnäherung zu bestimmen. Diese logarithmischen Korrekturen können mit den Berechnungen aus der 1-Schleifen-Näherung der renormierten Störungstheorie verglichen werden. Im Sinne der besseren Übereinstimmung mit den 1-Schleifen-Skalengesetzen kann eine der Fragestellungen dieser Arbeit, „Zeigen verbesserte Wirkungen ein verbessertes Skalenverhalten?“ bejaht werden.

6.1 Renormierungsgruppen-Gleichungen

Dieser Abschnitt kann nur einen kurzen Überblick über die Renormierungsgruppen-Gleichungen geben. Eine ausführlichere Behandlung des Themas findet man bei E. Brézin, J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin [86] und im Zusammenhang mit der $O(N)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie in [32, 84, 82].

Ausgangspunkt in den folgenden Betrachtungen ist das erzeugende Funktional mit der Standard-Gitterwirkung (3.3) [32]

$$\exp W(\mathcal{J}, \mathcal{K}) = \frac{1}{Z(j)} \int \mathcal{D}\phi \exp \left(-S\{\vec{\Phi}; J, \kappa\} + \sum_x \left[\mathcal{J}^\alpha(x) \Phi^\alpha(x) + \mathcal{K}(x) \mathcal{O}(x) \right] \right). \quad (6.1)$$

Über die Legendre-Transformierte von $W(\mathcal{J}, \mathcal{K})$ werden (unrenormierte) Vertexfunktionen der Felder $\Phi^\alpha(x)$ und des zusammengesetzten Feldes $\mathcal{O}(x)$ – der kinetischen Energie – eingeführt. Als Vertexfunktionen werden die Ein-Teilchen-irreduziblen, zusammenhängenden Greensfunktionen bezeichnet.

Aus den beiden Ableitungen

$$\frac{\partial S\{\vec{\Phi}; J, \kappa\}}{\partial \kappa} = - \sum_x \mathcal{O}(x), \quad \frac{\partial S\{\vec{\Phi}; J, \kappa\}}{\partial J} = - \sum_x \Phi_N(x) \quad (6.2)$$

der Standard-Wirkung nach den Parametern κ und J ergeben sich – für festgehaltene Selbstkopplung λ – entsprechende Beziehungen zwischen den *nackten* Vertexfunktionen.

In der Kontinuumsparametrisierung (vergl. Gl. (3.6)) entspricht $\mathcal{O}(x)$ dem Massenoperator $\phi^2(x)$ und die Variation wird nach den Parametern m_0^2 bzw. j ausgeführt. Auch die Vertexfunktionen $\Gamma^{(n,l)}(p_1, \dots, p_n; q_1, \dots, q_l)_{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ sind dann mit entsprechenden Faktoren $\sqrt{2\kappa}$ versehen.

Durch folgende Renormierungsbedingungen an die nackten Vertexfunktionen werden in der gebrochenen Phase (s. auch Gl. (5.70)) Wellenfunktions-Renormierungskonstanten Z und $Z_{\mathcal{O}}$, die renormierte Kopplung g_R und die renormierten σ - und Goldstone-Boson-Massen m_R und μ_R definiert, sowie entsprechende Konterterme zur Wirkung addiert [32]:

$$(2\kappa)^{-1} \Gamma^{(2,0)}(p, -p)_{ab} = -\delta_{ab} Z^{-1} \left\{ \mu_R^2 + p^2 + \mathcal{O}(p^4) \right\}_{(p \rightarrow 0)}, \quad (6.3)$$

$$\text{Re} \left\{ \Gamma^{(2,0)}(p, -p)_{NN} \Big|_{p=(im_R, 0, 0, 0)} \right\} = 0, \quad (6.4)$$

$$g_R = \frac{3Z(m_R^2 - \mu_R^2)}{\Sigma^2}, \quad (6.5)$$

$$\text{Re} \left\{ \Gamma^{(1,1)}(p, -p)_N \Big|_{p=(im_R, 0, 0, 0)} \right\} = \frac{\Sigma}{ZZ_{\mathcal{O}}}. \quad (6.6)$$

$\Sigma = \langle \phi_N \rangle$ bezeichnet – wie gehabt – den Felderwartungswert. Im Gegensatz zu [32, 84] ist hier die Kontinuumsparametrisierung gewählt worden¹.

Ausgehend von der störungstheoretischen Form der Wirkung in der gebrochenen Phase (3.11) werden die *nackten* Vertexfunktionen in der Schleifen-Näherung der Störungstheorie entwickelt. Die auftretenden Feynman-Diagramme werden auf dem

¹Die Beziehungen

$$\sqrt{2\kappa}v = \Sigma, \quad v_R = F, \quad 2\kappa Z_R = Z, \quad h/\sqrt{2\kappa} = j, \quad Z_R^{\mathcal{O}} = Z_{\mathcal{O}},$$

definieren den Übergang zwischen beiden Konventionen.

Gitter regularisiert und die renormierten Größen werden als Funktionen der nackten Größen und des Regulators, der Gitterkonstante a , ermittelt.

Das aus Gl. (6.2) abgeleitete Verhalten der nackten Vertexfunktionen wird – übertragen auf die zugehörigen renormierten Vertexfunktionen $\Gamma_R^{(n,l)} = (Z/2\kappa)^{n/2} Z_O^l \Gamma^{(n,l)}$ (für $n \geq 1$) – durch die Callan–Symanzik–Gleichung beschrieben:

$$\left\{ \mu_R \frac{\partial}{\partial \mu_R} + m_R \frac{\partial}{\partial m_R} + \beta \frac{\partial}{\partial g_R} - n\gamma - l\delta \right\} \Gamma_R^{(n,l)} \quad (6.7)$$

$$= \vartheta m_R \Gamma_R^{(n+1,l)}|_{p_{n+1}=0, \alpha_{n+1}=N} + \epsilon m_R^2 \Gamma_R^{(n,l+1)}|_{q_{l+1}=0} + \delta_{n1} \delta_{l0} \delta_{\alpha_1 N} \varpi m_R^3.$$

Die Koeffizienten dieser partiellen Differentialgleichung sind die Renormierungsgruppen-Funktionen $\beta, \gamma, \delta, \epsilon, \dots$:

$$\begin{aligned} \beta(m_R, g_R) &= m_R \frac{\left(\frac{\partial g_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda}{\left(\frac{\partial m_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda}; & \gamma(m_R, g_R) &= \frac{1}{2} m_R \frac{\left(\frac{\partial \ln(Z/2\kappa)}{\partial \kappa} \right)_\lambda}{\left(\frac{\partial m_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda}; \\ \delta(m_R, g_R) &= m_R \frac{\left(\frac{\partial \ln Z_O}{\partial \kappa} \right)_\lambda}{\left(\frac{\partial m_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda}; & \epsilon(m_R, g_R) &= \left(m_R Z_O \left(\frac{\partial m_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda \right)^{-1}; \\ \vartheta(m_R, g_R) &= \sqrt{\frac{2\kappa}{Z}} \frac{\left(\frac{\partial (\Sigma/\sqrt{2\kappa})}{\partial \kappa} \right)_\lambda}{\left(\frac{\partial m_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda}; & \varpi(m_R, g_R) &= \frac{Z^{1/2}}{2\kappa m_R^2} \frac{\left(\frac{\partial J}{\partial \kappa} \right)_\lambda}{\left(\frac{\partial m_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Sie steuern das Skalenverhalten der renormierten Parameter bei Annäherung an den kritischen Punkt ($J=0, \kappa=\kappa_c$) entlang von Trajektorien $J(\kappa)$ mit konstanter Selbstkopplung λ und bei festem Massen-Verhältnis $\mu_R/m_R = \varrho = \text{const.}$ Im ersten Teil der Arbeit wurden alle Simulationen mit verschwindender äußerer Quelle J , d.h. mit $\varrho=0$ (und bei $\lambda=\infty$) durchgeführt. Auch in diesem Fall sind die Renormierungsgruppen-Funktionen wohldefiniert [32]. Im zweiten Teil werden die Simulationsparameter mit Hilfe der Skalengesetze und der Ergebnisse zum ersten Teil so abgestimmt, daß der Bereich ($1/4 < \varrho < 1/2$), in dem die elastische Streuung erwartet wird, erreicht werden kann (s. Abb. 5.3).

Aus den Ward-Identitäten und den Normierungsbedingungen des Renormierungsschemas der Gleichungen (6.3) bis (6.6) ergeben sich zusätzliche algebraische Beziehungen zwischen den Renormierungsgruppen-Funktionen:

$$\vartheta(m_R, g_R) = (1 + \gamma - \beta/2g_R) \sqrt{3(1 - \varrho^2)/g_R} \quad (6.9)$$

$$\varpi(m_R, g_R) = \varrho^2 (3 - \gamma - \beta/2g_R) \sqrt{3(1 - \varrho^2)/g_R}. \quad (6.10)$$

Die Callan–Symanzik–Gleichung für sich ist eine exakte Identität, die sich aus der Definition der renormierten Vertexfunktionen ergibt. Die störungstheoretische Entwicklung der Renormierungsgruppen-Funktionen gewinnt man, indem man das

lineare Gleichungssystem, das die Callan-Symanzik-Gleichung darstellt, für eine entsprechende Anzahl (unabhängiger) renormierte Vertexfunktionen löst. Unter Annahme, daß die renormierte Kopplung g_R in der Nähe der kritischen Linie klein ist, lassen sich auf diese Weise die Renormierungsgruppen-Funktionen in renormierter Störungstheorie entwickeln.

Auch die Skalenhypothese (s. Abschnitt 3.3 über verbesserte Wirkungen) für die renormierten Vertexfunktionen läßt sich so auf die Renormierungsgruppen-Funktionen übertragen: sie sind im Skalengebiet (d.h. nahe der kritischen Linie) bis auf skalenverletzende Terme, die mit einer Potenz von m_R verschwinden, unabhängig von der Skala m_R . Mit diesen Annahmen sind die Gleichungen (6.8) als ein gekoppeltes System von Differentialgleichungen für m_R , g_R , Z und Z_O als Funktionen von κ (und J) bei festem λ (und Massenverhältnis ϱ) zu verstehen, die das Verhalten dieser renormierten Größen für $\kappa \rightarrow \kappa_c$ ($J \rightarrow 0$) beschreiben:

$$\begin{aligned} m_R \left(\frac{\partial g_R}{\partial m_R} \right)_\lambda &= g_R \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i g_R^i, & \frac{1}{2} m_R \left(\frac{\partial \ln(Z/2\kappa)}{\partial m_R} \right)_\lambda &= \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i g_R^i, \\ m_R \left(\frac{\partial \ln Z_O}{\partial m_R} \right)_\lambda &= \sum_{i=1}^{\infty} \delta_i g_R^i, & \left(m_R Z_O \left(\frac{\partial m_R}{\partial \kappa} \right)_\lambda \right)^{-1} &= \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon_i g_R^i. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Die Ergebnisse der störungstheoretischen Berechnungen für die Koeffizienten β_i , γ_i , δ_i , ϵ_i für den Grenzfall $j=0$ sind in Anhang B von [32] nachzulesen. Die wichtigsten Koeffizienten sind (vgl. auch [86]):

$$\beta_1 = \frac{1}{3} \frac{(N+8)}{(4\pi)^2}, \quad \beta_2 = -\frac{1}{3} \frac{(3N+14)}{(4\pi)^4}, \quad \delta_1 = -\frac{1}{3} \frac{(N+2)}{(4\pi)^2}. \quad (6.12)$$

Die β -Funktion ist – zumindest bis zur 3-Schleifen-Ordnung – positiv und die ersten beiden Koeffizienten sind unabhängig vom Renormierungsschema. Wenn also die Kopplung g_R einmal so klein ist, daß die Störungstheorie zur Berechnung der β -Funktion anwendbar wird, so nimmt sie mit kleiner werdender Masse m_R noch kleinere Werte an. Dies bedeutet, daß die Annäherung an die kritische Linie nicht aus dem störungstheoretischen Bereich herausführen kann. Also besitzt die $O(N)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie in vier Dimensionen nur den trivialen Fixpunkt $g_R^* = 0$, d.h. sie wird eine freie Feldtheorie.

Die Integration der mittels der renormierten Störungstheorie abgeleiteten Renormierungsgruppen-Gleichungen (6.11) liefert für $j=0$ bis auf Korrekturen $\mathcal{O}(g_R)$ folgende Skalengesetze:

$$\begin{aligned} m_R &= C \left(\frac{1}{\beta_1 g_R} \right)^{\beta_2/\beta_1^2} \exp \left(-\frac{1}{\beta_1 g_R} \right), & Z &= C_Z, \\ Z_O &= C_O g_R^{\delta_1/\beta_1}, & \kappa - \kappa_c &= C' m_R^2 g_R^{\delta_1/\beta_1}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Das numerische Verfahren zur Integration des gekoppelten Systems von Differentialgleichungen (6.11) bis zur 3-Schleifen-Ordnung und einschließlich der Berücksichtigung von skalenverletzenden Effekten wird in Anhang D näher erläutert.

	κ_c	C_Σ	C_m	δ_1/β_1
Standard-Wirkung	0.30423(1)	0.877(6)	4.60(1)	-0.63(1)
verbesserte Wirkung	0.33592(1)	0.770(2)	4.49(1)	-0.54(1)

Tabelle 6.1: Fit-Ergebnisse aus der Analyse des Skalenverhaltens mit den Skalengesetzen (6.14) und (6.15). Die Werte von δ_1/β_1 sind mit $\delta_1/\beta_1 = -0.5$ aus der 1-Schleifen-Störungstheorie zu vergleichen.

6.2 Numerische Ergebnisse zur Untersuchung des Skalenverhaltens

Die numerischen Ergebnisse für den Felderwartungswert Σ , die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z und die σ -Masse m_σ aus Abschnitt 5.5 werden nun einer Untersuchung ihres Skalenverhaltens unterworfen. Da $\lambda = \infty$ und $j = 0$ gesetzt worden sind, ist die verbleibende charakteristische Größe zur Beschreibung des Skalenverhaltens bei Annäherung an den kritischen Punkt κ_c die Variable $\tau = \kappa/\kappa_c - 1$.

Zunächst werden die Skalengesetze angewendet, die außer der Molekularfeld-Approximation logarithmische Korrekturen aus der 1-Schleifen-Störungstheorie enthalten. Im $O(N)$ -Modell ergeben sich aus den Gleichungen (6.13) die Skalengesetze:

$$\Sigma^2 = C_\Sigma^2 \tau |\ln(\tau)|^{1+\delta_1/\beta_1}, \quad (6.14)$$

$$m_\sigma^2 = C_m^2 \tau |\ln(\tau)|^{\delta_1/\beta_1}, \quad (6.15)$$

$$Z = C_Z \quad (6.16)$$

mit $C_\Sigma, C_m, C_Z = \text{const.}$ Der kritische Exponent δ_1/β_1 der logarithmischen Korrektur wird mit $\delta_1/\beta_1 = -(N+2)/(N+8)$ vorhergesagt (s. Gl. (6.12)). Er nimmt für $N=4$ den Wert $\delta_1/\beta_1 = -1/2$ an [86]. Es sei erneut darauf hingewiesen, daß in dem verwendeten Renormierungsschema $m_\sigma = m_R + \mathcal{O}(g_R^2)$ gilt².

Die Σ^2 -Daten werden mit dem Ansatz (6.14) zur Bestimmung der drei freien Parameter C_Σ, κ_c und δ_1/β_1 gefittet. Mit den so gewonnen Werten für κ_c und δ_1/β_1 wird der verbleibende Parameter C_m aus den m_σ -Daten bestimmt. Die Ergebnisse dieser Fits für die Parameter C_m, C_Σ, κ_c und δ_1/β_1 sind in Tabelle 6.1 für die Standard- und für die im Sinne Symanziks verbesserte Wirkung aufgelistet.

Die angegebenen Fehler aus einem χ^2 -Fit an die Daten mögen unterschätzt sein, da sie die Korrelationen zwischen den Datenpunkten als Folge der analytischen Fortsetzung (Histogramm-Methode) nicht berücksichtigen. Zur Abschätzung der systematischen Fehler wurde die Zahl der Datenpunkte, die in den Fit eingehen, variiert, was für κ_c Abweichungen im Bereich zweier Standardabweichungen ergibt. Der Exponent δ_1/β_1 unterliegt Schwankungen, die das fünffache des statistischen Fehlers betragen können.

²Explizit ist für $j=0$: $m_\sigma = m_R \left\{ 1 + \frac{(N-1)^2}{288(16\pi)^2} g_R^2 + \mathcal{O}(g_R^3) \right\}$ berechnet worden [32].

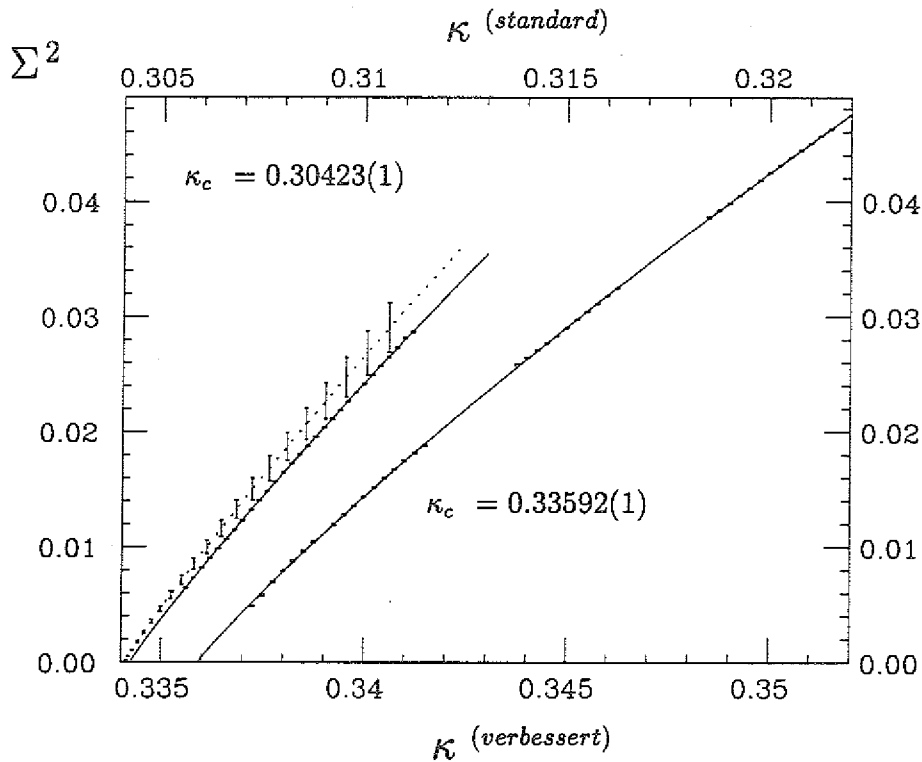


Abbildung 6.1: Das Quadrat des Felderwartungswertes Σ als Funktion von κ für die Standard-Wirkung (linke Kurve, obere κ -Skala) bzw. die *verbesserte* Wirkung (rechte Kurve, untere κ -Skala). Die durchgezogenen Linien sind Fits mit dem Skalengesetz (6.14). Im Fall der Standard-Wirkung besteht die Möglichkeit, mit den Resultaten von Lüscher und Weisz [32] zu vergleichen. Unsere Σ^2 Werte liegen am unteren Rand ihrer Berechnungen (gepunktete Linie).

Im Fall der *verbesserten* Wirkung findet man schon eine zufriedenstellende Übereinstimmung des kritischen Exponenten δ_1/β_1 mit den störungstheoretischen Vorhersagen aus der 1-Schleifen-Näherung. Für die Standard-Wirkung zeigt das Fit-Ergebnis für δ_1/β_1 jedoch, daß wir eine genauere Untersuchung durchführen müssen, wenn wir die Übereinstimmung mit den störungstheoretischen Vorhersagen verlässlich überprüfen wollen. Nichtperturbative Effekte werden aus Gründen der Trivialität der Φ^4 -Theorie in vier Dimensionen allerdings nicht erwartet. Im Falle der Standard-Wirkung wird daher eine numerische Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen unter Verwendung der 3-Schleifen-Entwicklungen von Lüscher und Weisz [32] durchgeführt. Diese Entwicklungen enthalten auch skalenverletzende Terme bis zum 1-Schleifen-Niveau. In Anhang D wird eine kurze Zusammenfassung über das numerische Verfahren zur Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen (6.11) für die hier untersuchte gebrochene Phase des $O(N)$ -Modelles gegeben.

Die Integration erfordert allerdings auch einen Startparameter für die Renormierungskonstante Z_O des zusammengesetzten Feldes $O(x)$, das in Gl. (4.22) definiert worden ist. Da dieser Parameter nicht direkt in den Monte-Carlo-Simulationen ge-

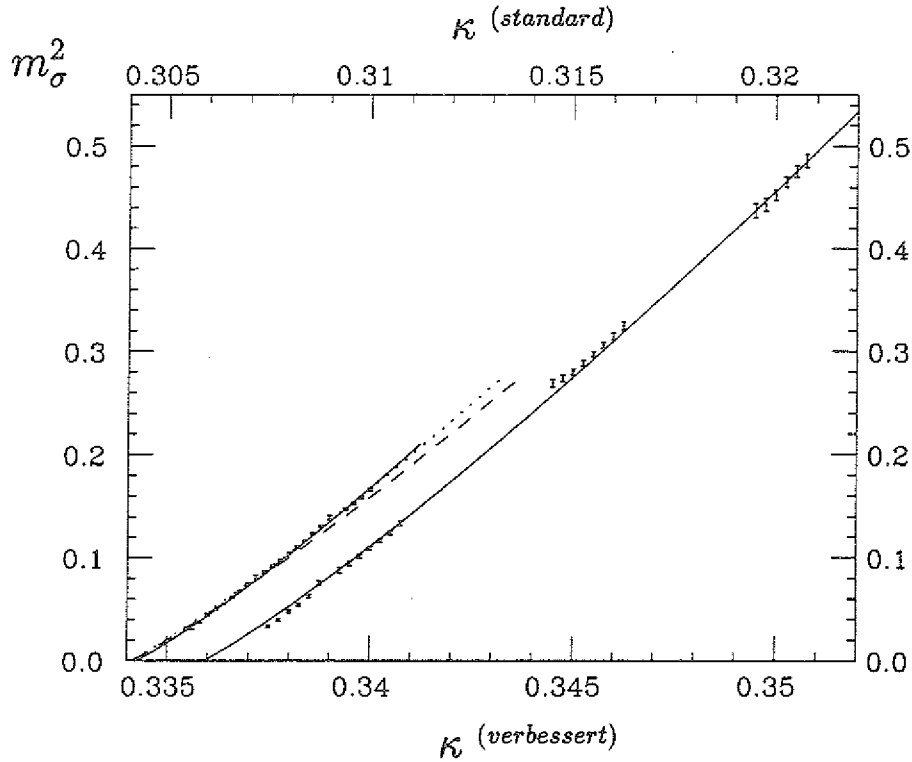


Abbildung 6.2: Das Quadrat der σ -Masse als Funktion von κ für die Standard-Wirkung (linke Kurve, obere κ -Skala) bzw. die verbesserte Wirkung (rechte Kurve, untere κ -Skala). Die durchgezogenen Linien sind Fits mit dem Skalen-Gesetz (6.15). Im Fall der Standard-Wirkung besteht die Möglichkeit, mit den Resultaten von Lüscher und Weisz [32] zu vergleichen: Unsere σ -Massen liegen zwischen ihren 2-Schleifen (gepunktete Linie) und 3-Schleifen (gestrichelte Linie) Vorhersagen.

messen worden ist, wird folgender Trick zu seiner Bestimmung angewendet: Erst werden zwei Datenpunkte $(\Sigma, m_\sigma, Z)_{1,2}$ ausgewählt, d.h. also insgesamt sechs Parameter anstatt der vier Parameter für einen Startpunkt (v_R, m_R, Z_R, Z_O) bei [32]. Dann wird der Startpunkt $(Z_O)_1$ so optimiert, daß die Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen ausgehend von Datenpunkt 1 den Endpunkt 2 bestmöglich annähert. Mit dem so ermittelten Startpunkt $(\Sigma, m_\sigma, Z, Z_O)_1$ können die Renormierungsgruppen-Gleichungen nun in der konventionellen Weise integriert werden. Als Punkt 1 sind die Ergebnisse von Σ , m_σ und Z bei $\kappa = 0.306$ gewählt worden, für Punkt 2 diejenigen bei $\kappa = 0.308$ bzw. $\kappa = 0.310$.

Die Übereinstimmung der Daten mit den Ergebnissen aus der Integration der 3-Schleifen-Näherung der Renormierungsgruppen-Gleichungen ist von der gleichen Qualität, wie die Übereinstimmung mit dem Ansatz über die 1-Schleifen-Skalengesetze (6.14) und (6.15). Die Abweichungen des freien Fit-Parameters δ_1/β_1 von der störungstheoretischen 1-Schleifen-Vorhersage ($\delta_1/\beta_1 = -1/2$) können also gut durch vernachlässigte höhere Schleifen-Korrekturen oder skalenverletzende Terme erklärt werden. Für größere κ -Werte sind die Ansätze (6.14) und (6.15) folglich nur mit freien

κ	Σ	m_σ	Z	
0.3060	0.09045(10)	0.2072(7)	0.977(3)	diese Arbeit
0.3059(2)	0.097(3)	0.210	0.972(6)	2-Schleifen
0.3060(2)	0.096(3)	0.210	0.972(6)	3-Schleifen
0.3080	0.12827(6)	0.3223(12)	0.972(3)	diese Arbeit
0.3079(3)	0.139(4)	0.320	0.973(6)	2-Schleifen
0.3081(3)	0.137(4)	0.320	0.973(6)	3-Schleifen
0.3100	0.15549(10)	0.4073(17)	0.964(7)	diese Arbeit
0.3100(5)	0.170(6)	0.410	0.974(7)	2-Schleifen
0.3101(5)	0.164(6)	0.400	0.974(7)	3-Schleifen

Tabelle 6.2: Vergleich der analytischen Ergebnisse von Lüscher und Weisz (zweite und dritte Zeile) mit den Daten aus der zu dieser Arbeit durchgeführten numerischen Simulation (erste Zeile). Für die Berechnung der 2- und 3-Schleifen-Ergebnisse sind dieselben Methoden benutzt worden, die auch zu den Resultaten aus Tabelle 8 in [32] führten.

Fit-Parametern brauchbar³. Aus diesem Grund kommt es auch zu geringfügigen Unterschieden zwischen der 1-Schleifen-Näherung mit variablen Parametern und der 3-Schleifen-Näherung mit durch die Störungstheorie festgelegten Parametern bei der Extrapolation zum kritischen Punkt κ_c . Jedoch liegen diese Abweichungen im Bereich der schon oben erwähnten zwei Standardabweichungen.

Das Ergebnis von δ_1/β_1 für die *verbesserte* Wirkung impliziert, daß solche gerade für den Fall der Standard-Wirkung beschriebenen Diskrepanzen hier im ganzen Bereich der untersuchten κ -Werte unterdrückt sind. In diesem Sinne kann der *verbesserten* Wirkung ein *verbessertes* Skalenverhalten zugeschrieben werden.

Die Abbildungen 6.1 und 6.2 zeigen die Quadrate der Felderwartungswerte Σ und der Massen m_σ jeweils als Funktion von κ . Die Ergebnisse für die Standard-Wirkung sind links dargestellt, für sie gilt die obere κ -Skala. Die Resultate für die im Sinne Symanziks verbesserte Wirkung werden rechts gezeigt, für sie ist die untere κ -Skala maßgeblich. Die durchgezogenen Linien repräsentieren die soeben beschriebenen Fits mit den Skalengesetzen (6.14) und (6.15).

³Versucht man, die 3-Schleifen-Resultate von Lüscher und Weisz [32] durch Fits mit den 1-Schleifen-Skalengesetzen anzunähern, so mißt man übrigens einen ähnlichen Abfall des Exponenten δ_1/β_1 .

6.3 Vergleich mit den analytischen Vorhersagen

Im Falle der Standard-Wirkung können die Ergebnisse aus dieser Arbeit mit denen von Lüscher und Weisz [32] verglichen werden: In Abbildungen 6.1 liegen die hier gemessenen Σ^2 -Werte knapp unterhalb der unteren Enden der Fehlerbalken ihrer Datenpunkte (gepunktete Linie). Die in der vorliegenden Arbeit gemessenen σ -Massen (s. Abbildung 6.2) liegen zwischen ihren 2-Schleifen- (gepunktete Linie) und ihren 3-Schleifen-Vorhersagen (gestrichelte Kurve).

In Tabelle 6.2 wird dieser Vergleich explizit am Beispiel einiger repräsentativer κ -Werte quantifiziert. Die größeren Fehler der analytischen Σ -Ergebnisse sind eine Folge der Unsicherheiten der g_R -Bestimmung durch die Hochtemperatur-Entwicklung und die störungstheoretische Entwicklung der β -Funktion. Die hier verwendete numerische Bestimmung des Felderwartungswertes Σ ist wesentlich präziser.

Kapitel 7

Regularisierungsabhängigkeit der oberen Schranke für die Higgs-Boson-Masse

Die Trivialität der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie bedeutet: Will man eine wechselwirkende Theorie behalten, darf der Abschneideimpuls nicht gegen Unendlich geschickt werden. Für einen endlichen *cutoff* muß man allerdings in Kauf nehmen, daß die Ergebnisse eine Regularisierungsabhängigkeit aufweisen können. Eine Möglichkeit, die Regularisierungsabhängigkeit zu testen, besteht in der Untersuchung unterschiedlicher Gitter-Regularisierungen bzw. Wirkungen, die im Kontinuumslimites allerdings dieselbe renormierte Quantenfeldtheorie beschreiben. Zwar wird im physikalisch interessanten Skalenbereich keine große Abhängigkeit von der Art der Regularisierung erwartet, doch soll dies in diesem Kapitel in bezug auf die obere Schranke für die Higgs-Masse anhand der numerischen Resultate aus den vorangehenden Kapiteln genauer untersucht werden.

7.1 Numerische Ergebnisse zur Untersuchung der oberen Schranke für die Higgs-Masse

Abbildung 7.1 zeigt die Ergebnisse für das Verhältnis m_σ/F als Funktion der Korrelationslänge $1/m_\sigma$ des σ -Teilchens. Zur Untersuchung des Skalenverhaltens werden die Daten mit einem Ansatz gefittet, der durch die störungstheoretische 2-Schleifen-Näherung der β -Funktion motiviert ist (vergl. Gl. (3.22)):

$$\frac{1}{m_\sigma} = \frac{1}{C} \left(\frac{F^2}{3c_1 m_\sigma^2} \right)^{c_2} \exp \left(\frac{F^2}{3c_1 m_\sigma^2} \right). \quad (7.1)$$

Für das $O(N)$ -Modell liefert die Störungstheorie folgende Werte für die Exponenten (s. Gl. (6.12)) – wir benötigen jedoch wieder nur $N = 4$):

$$c_1 = \beta_1 = \frac{1}{16\pi^2} \frac{N+8}{3} = \frac{1}{4\pi^2}, \quad c_2 = -\frac{\beta_2}{\beta_1^2} = \frac{3(3N+14)}{(N+8)^2} = \frac{13}{24}. \quad (7.2)$$

	Verbesserte Wirkung		Standard-Wirkung		
	$c_2 = 0$	$c_2 = 13/24$	$c_2 = 0$	$c_2 = 13/24$	LW [32, 86]
β_1	0.0212(1)	0.0292(2)	0.0236(1)	0.0303(1)	0.02533
$\ln C$	1.066(7)	0.713(10)	1.174(9)	0.982(11)	1.9(1)

Tabelle 7.1: Numerische Ergebnisse für die Konstante C und den β_1 -Koeffizienten der β -Funktion. Die jeweils erste Spalte zeigt die der 1-Schleifen-Formel entsprechenden Ergebnisse. In der jeweils zweiten Spalte wurden 2-Schleifen-Korrekturen mitberücksichtigt, bei denen c_2 auf dem Wert $13/24$ festgehalten wurde. Die Werte lassen sich mit den Ergebnissen von Lüscher und Weisz [32] vergleichen ($\ln C$ nur im Fall der Standard-Wirkung).

Da die numerischen Ergebnisse – beschränkt durch die technisch realisierbaren Gittervolumina – nur ein sehr kleines Intervall von m_σ/F -Werten überstreichen, ist ein Fit mit drei freien Parametern C , c_1 , c_2 nicht stabil genug. Der Grund dafür ist, daß der Exponentialfaktor $\exp(F^2/(3c_1 m_\sigma^2))$ und der Potenzfaktor $(F^2/(3c_1 m_\sigma^2))^{c_2}$ in Abhängigkeit variabler Parameter ein qualitativ ähnliches Aussehen haben. Darum ist eine Bestimmung von c_2 mit dem Ansatz (7.1) nicht möglich, aber C und c_1 können durch einen Fit mit dem entsprechenden 1-Schleifen Ansatz ($c_2 = 0$) bestimmt werden. Um die systematischen Fehler abzuschätzen, ist ein zweiter Fit durchgeführt worden, bei dem der Wert $c_2 = 13/24$ festgehalten wurde, mit dem es von der 2-Schleifen Störungstheorie vorhergesagt wird (s. Gl. (7.2)). Die Ergebnisse hierzu stehen in Tabelle 7.1. Die Übereinstimmung der Resultate für β_1 mit der störungstheoretischen Vorhersage ist zufriedenstellend. Für beide Gitterregularisierungen liegt der störungstheoretische Wert zwischen den Ergebnissen für die beiden unterschiedlichen 1- und 2-Schleifen-Fits. Die in der Tabelle vermerkten Fehler mögen wieder unterschätzt sein, weil sie etwaige Korrelationen der Daten unberücksichtigt lassen. Das Ergebnis von $\ln C$ in der Standard-Wirkung läßt sich wieder mit der Vorhersage von Lüscher und Weisz [32] vergleichen.

Wird auch β_1 auf seinem perturbativen Wert fixiert, so kann ein 1-Parameter-Fit für $\ln C$ durchgeführt werden. Man erhält $\ln C = 1.445(1)$ für die Standard-Wirkung und $\ln C = 0.985(1)$ für die verbesserte Wirkung. (Die angegebenen statistischen Fehler mögen zu klein sein, weil Korrelationen vernachlässigt worden sind.) Fast die gleichen Werte für $\ln C$ erhält man, wenn die Renormierungsgruppen-Gleichungen, wie in Kapitel 6 beschrieben, ausgehend von Meßpunkten $1/m_\sigma$, m_σ/F in Richtung des kritischen Punktes integriert werden. Werden unterschiedliche Startpunkte gewählt und die β -Funktion variiert, indem man die 2 oder 3-Schleifen Näherung mit und ohne skalenverletzende Terme benutzt, so ergeben sich Abweichungen in $\ln C$ von maximal 20%.

Abbildung 7.1 gibt jedoch nicht nur Aufschluß über die Koeffizienten der β -Funktion, sondern veranschaulicht auch den wichtigen Begriff der Trivialität in

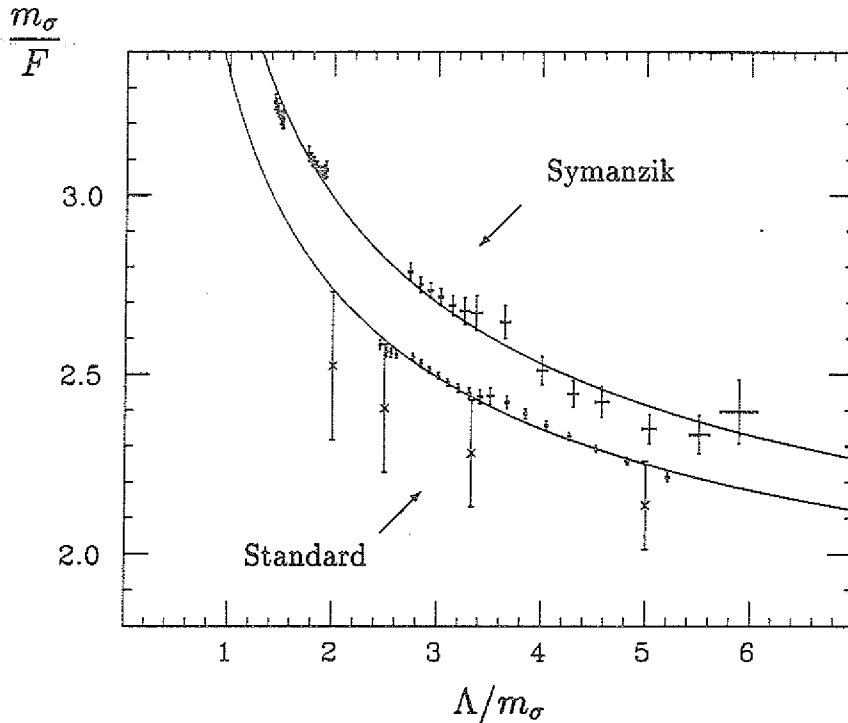


Abbildung 7.1: Der Quotient m_σ/F für die Standard-Wirkung (untere Reihe verbundener Datenpunkte) und für die *verbesserte* Wirkung (obere Reihe verbundener Datenpunkte) als Funktion des Verhältnisses Λ/m_σ ; $\Lambda = 1/a$. Die Ergebnisse für die Standard-Wirkung sind mit den Resultaten von Lüscher und Weisz (x, Tabelle 8 in [32]) zu vergleichen: der Fehlerdiskussion in dieser Referenz folgend werden ihre Datenpunkte mit verdoppelten Fehlern gezeigt. Die durchgezogenen Linien gehören zu Fits an die Daten mit einem Ansatz aus dem störungstheoretisch vorhergesagten Skalen-Gesetz.

der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie. Trivialität bedeutet in diesem Zusammenhang, daß bei expliziter Durchführung des Kontinuumslimites $a \rightarrow 0$ bzw. äquivalent dazu im Grenzfall eines unendlichen Abschneideimpulses $\Lambda \rightarrow \infty$ eine wechselwirkungsfreie Theorie vorliegt. Führen wir die Regularisierungs-Parameter a oder Λ wieder ein, so bedeutet dieser Grenzwert in Abbildung 7.1:

$$\frac{1}{am_\sigma} = \frac{\Lambda}{m_\sigma} \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \frac{m_\sigma}{F} \sim \sqrt{g_R} \rightarrow 0. \quad (7.3)$$

Aufgrund dieser Trivialität kann die 4dimensionale Φ^4 -Theorie nur als effektive Feldtheorie verstanden werden, die nur für einen endlichen Wert des Abschneideimpulses wechselwirkend ist und eine nichtverschwindende physikalische Teilchenmasse besitzt. Wird gefordert, daß diese Teilchenmasse m_σ mindestens um einen Faktor ρ ($\rho < 1$) kleiner als der Abschneideparameter $1/a$ ist, so können die Daten aus Abbildung 7.1 benutzt werden, um eine obere Schranke für die physikalische Masse des Higgs-Teilchens anzugeben, indem die Funktion m_σ/F beim Wert $1/\rho$ abgelesen

wird:

$$\frac{\Lambda}{m_\sigma} \geq \rho^{-1} \implies m_\sigma [\text{GeV}] \leq \frac{m_\sigma}{F} (\rho^{-1}) \cdot 246 \text{ GeV}, \quad (7.4)$$

denn die schwache Skala $F = 246 \text{ GeV}$ ist experimentell bekannt. Zumindest qualitativ ist direkt einsichtig, daß eine Bedingung dieser Art gestellt werden muß, da eine Teilchen-Masse oberhalb des Impuls-Abschneideparameters unphysikalisch ist.

Es sind verschiedene Kriterien entwickelt worden, den Faktor ρ und somit die Angabe der oberen Schranke für die σ -Masse genauer zu präzisieren. Damit beschäftigt sich der folgende Abschnitt.

7.2 Kriterien zum Vergleich unterschiedlicher Regularisierungen

Die einfachste Möglichkeit besteht in der Wahl eines kleinen, festen, regularisierungsunabhängigen Wertes für ρ (z.B. $\rho=0.5$) [83]. Damit würde man in Abb. 7.1 für festes $1/\rho=2$ verschiedene obere Schranken für die unterschiedlichen Regularisierungen erhalten. Das *ad hoc*-Kriterium $m_\sigma \leq 0.5/a$ vernachlässigt allerdings skalenverletzende Terme, die von der Art der Regularisierung, sprich Gitter-Wirkung, abhängen – so könnte man auf den ersten Blick meinen. Allerdings könnte man ρ gerade so fixieren, daß die relativen Abweichungen in der renormierten Kopplung zwischen zwei unterschiedlichen Regularisierungen einen bestimmten Prozentsatz nicht übersteigen. Fordert man eine maximale Abweichung von ca. 10% für die beiden untersuchten Einhüllenden in Abb. 7.1, so landet man wieder bei $\rho=0.5$. Ein wesentlicher Nachteil dieser Betrachtung ist, daß man für eine genaue Abschätzung eigentlich alle möglichen unterschiedlichen Regularisierungen studieren müßte, der Vergleich mit dem Kontinuum ist nicht möglich, da im Kontinuumslimites $g_R=0$ ist.

Eine Verfeinerung dieser Methode fordert die Universalität (Gleichheit) der renormierten Kopplung in den unterschiedlichen Regularisierungen sehr nahe am kritischen Punkt [88]. Mit Hilfe des Skalengesetzes (3.22) für feste Werte der physikalischen Größen m_R und g_R bedeutet diese Forderung, daß für zwei unterschiedliche Regularisierungen das Verhältnis $C^{(i)}/a^{(i)}$, ($i=1,2$) konstant sein müßte. Anschaulich ausgedrückt hätte man die einhüllenden Kurven in Abb. 7.1 bei ausreichend großen Werten von $1/m_\sigma$ für festgehaltenes m_σ/F übereinanderzuschieben, d.h. mit einem Faktor $C^{(1)}/C^{(2)}$ zu reskalieren, da sie dort ein universelles Verhalten besitzen müßten. Das Reskalieren fixiert das Verhältnis der Abschneideparameter $a^{(2)}/a^{(1)}$ der beiden unterschiedlichen Regularisierungen. Die obere Schranke wird – wie oben auch – für die verschobenen bzw. reskalierten Einhüllenden durch die Forderung bestimmt, daß der Wert der renormierten Kopplung bei kleineren Werten von $1/m_\sigma$ zwischen den beiden unterschiedlichen Regularisierungen nur um einen bestimmten Prozentsatz abweichen darf. Ein zusätzlicher Nachteil – zu dem oben schon genannten – ist hierbei allerdings, daß als weiterer Parameter der Wert der renormierten Kopplung vorgegeben werden muß, bei dem die Universalität des störungstheoretischen Skalengesetzes Gültigkeit haben soll. Allerdings stellt man nach der Reskalierung (verständlicherweise) keine so großen Abweichungen mehr zwischen den beiden Einhüllenden bei kleineren Werten von $1/m_\sigma$ fest.

Aus den Fits zu dem Parameter $\ln C$ kann der relative Reskalierungsfaktor zwischen den Abschneideparametern beider Gitterregularisierungen ermittelt werden. Wegen der großen Ungenauigkeit in der Bestimmung von $\ln C$ ergeben sich für das Verhältnis $a^{(2)}/a^{(1)}$ Werte im Bereich von 1.1 bis 1.5 ((1)=Standard, (2)=verbesserte Wirkung). Wählen wir exemplarisch aus den Tabellen 5.1 und 5.2 die Datenpunkte $\kappa = 0.3060$ und $\kappa = 0.33775$ für die Standard- bzw. verbesserte Wirkung aus, so ergibt sich dort für einen (festen, kleinen) Wert von $m_\sigma/F \approx 2.35$ ein Verhältnis von $a^{(2)}/a^{(1)} = 1.25$. Lassen wir nun eine maximale relative Abweichung von ca. 2% für die beiden reskalierten Einhüllenden in Abb. 7.1 zu, so haben wir die oberen Schranken bei $\rho = 0.5$ abzulesen. In den nichtreskalierten Kurven aus Abb. 7.1 entspricht dies $1/m_\sigma = 2$ für die Standard- und $1/m_\sigma = 2.5$ für die verbesserte Wirkung.

Allgemein lassen sich solche Kriterien folgendermaßen formulieren: Für einen festen Wert der nackten Kopplung (hier $\lambda = \infty$) sollen physikalische Observable $\mathcal{Q}$ bzw. ihre Abweichungen vom Kontinuumsverhalten für zwei unterschiedliche Regularisierungen mit $a^{(1)}m_\sigma$ und $a^{(2)}m_\sigma$ übereinstimmen:

$$\mathcal{Q}(a^{(1)}m_\sigma) = \mathcal{Q}(a^{(2)}m_\sigma). \quad (7.5)$$

Aus der Forderung nach Gleichheit ergibt sich eine Beziehung für das Verhältnis der Abschneideparameter $a^{(2)}/a^{(1)}$. Im obigen Beispiel ist die Größe $\mathcal{Q}$ die renormierte Kopplung bei sehr kleinen Werten der σ -Masse. Beschreibt $\mathcal{Q}$ die Abweichung einer physikalischen Observable vom Kontinuumsverhalten, so können aus der Begrenzung der Abweichung die Parameter ρ^i bestimmt werden, bei denen für die unterschiedlichen Regularisierungen $i = 1, 2$ die obere Schranke gemäß Abb. 7.1 abgelesen werden muß:

$$\mathcal{Q}(a^{(i)}m_\sigma) < \epsilon_c \implies a^{(i)}m_\sigma \leq \rho^{(i)} \quad (i = 1, 2). \quad (7.6)$$

Abgesehen davon, daß der universelle (lineare) Zusammenhang zwischen den Abschneideparametern verschiedener Regularisierungen aus dem obigen Kriterium angezweifelt wird [90,84], erscheint es sinnvoller, die Schranke für m_σ mit einer Schranke an maximal erlaubte Skalenverletzungen physikalisch relevanterer Observabler in Verbindung zu bringen. Es gibt unterschiedliche Größen, mit denen sich die skalenverletzenden Eigenschaften in den verschiedenen Regularisierungsschemata messen lassen. Am besten geeignet sind physikalische Größen, deren Regularisierungsabhängigkeit direkt mit den entsprechenden Kontinuumsgrößen verglichen werden kann.

$$\delta_{\mathcal{Q}} = \frac{\mathcal{Q}(a^{(i)}m_\sigma)}{\mathcal{Q}(\bar{m}_\sigma)} - 1, \quad \bar{m}_\sigma = \lim_{a^{(i)} \rightarrow 0} (a^{(i)}m_\sigma). \quad (7.7)$$

Mit einem solchen Kriterien beschäftigt sich der folgende Teilabschnitt 7.2.1. Einem Vorschlag von Lüscher und Weisz [32] folgend, wird dort die Streuung der Goldstone-Bosonen untersucht.

7.2.1 Wirkungsquerschnitt der Goldstone-Boson-Streuung

Da die Bestimmung der Streuamplituden mittels Monte-Carlo-Rechnungen, wie der zweite Teil dieser Arbeit darlegen wird, nicht einfach ist, werden störungstheoretische Rechnungen durchgeführt. Die störungstheoretischen Überlegungen sollten zuverlässige Ergebnisse liefern, da die Störungstheorie – wie wir oben gesehen haben –

zumindest im Skalenbereich bisher erfolgreich angewendet worden ist. Da außerdem in dieser eher qualitativen Diskussion keine hohe Präzision verlangt wird, ist Lüscher und Weisz [32] folgend der differentielle Wirkungsquerschnitt der Goldstone-Boson-Streuung im Schwerpunktsystem lediglich auf dem Baum-Niveau der Störungstheorie berechnet worden.

Aus der Wirkung (3.11) mit $j = 0$ erhält man für die Streuung zweier Goldstone-Bosonen mit dem gleichen $O(N)$ -Index in ein beliebiges Paar anderer Goldstone-Bosonen folgenden differentiellen Wirkungsquerschnitt [87]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\vec{p}'|^2}{16\pi^2} \frac{1}{|E'(\vec{p})E'(\vec{p}')|} \left[\frac{1+4\omega}{2\sinh(W/2) + 4\omega\sinh W} \right]^4 \times \left[(N-2)A(\hat{s})^2 + (A(\hat{s}) + A(\hat{t}) + A(\hat{u}))^2 \right]. \quad (7.8)$$

Hierbei bezeichnen $\vec{p}$ und $\vec{p}'$ den einlaufenden bzw. auslaufenden Impuls im Schwerpunktsystem. $E(\vec{p})$ ist die (Gitter-)Energie eines einzelnen Goldstone-Bosons mit Impuls $\vec{p}$, und

$$W = 2E(\vec{p}) = 2E(\vec{p}') \quad (7.9)$$

ist die Gesamtenergie. Des weiteren sind folgende Abkürzungen verwendet worden:

$$E'(\vec{p}) = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \cdot \nabla E(\vec{p}), \quad (7.10)$$

$$A(z) = \frac{g_R}{3m_R^2} \left[\sinh^2(m_R/2) + \omega \sinh^2 m_R \right] z \times \left[\sinh^2(m_R/2) + \omega \sinh^2 m_R - \frac{1}{4}(1+4\omega)z \right]^{-1}, \quad (7.11)$$

$$\hat{s} = \frac{4}{1+4\omega} \left[\sinh^2 E(\vec{p}) + \omega \sinh^2 (2E(\vec{p})) \right], \quad (7.12)$$

$$\hat{t} = -\frac{4}{1+4\omega} \sum_{j=1}^3 \left[\sin^2((p'_j - p_j)/2) + \omega \sin^2(p'_j - p_j) \right], \quad (7.13)$$

$$\hat{u} = -\frac{4}{1+4\omega} \sum_{j=1}^3 \left[\sin^2((p'_j + p_j)/2) + \omega \sin^2(p'_j + p_j) \right]. \quad (7.14)$$

Die Gitter-Dispersionsrelation $E(\vec{p})$ wird durch die (komplexen) Pole des freien Goldstone-Boson-Propagators bestimmt. Im Fall der Standard-Wirkung ($\omega = 0$) haben wir:

$$\cosh E(\vec{p}) = 1 + \sum_{j=1}^3 2 \sin^2 \left(\frac{p_j}{2} \right). \quad (7.15)$$

Für die *verbesserte* Wirkung ($\omega = -1/16$) oder, ganz allgemein für $\omega \neq 0$, wird die Situation komplizierter, da zusätzliche Pole auftreten. Diese sind jedoch unphysikalisch in dem Sinn, daß ihre Energien im Kontinuumsimes gegen Unendlich streben. Bei genügend großen Impulsen kann außerdem passieren, daß es überhaupt keinen Pol auf der imaginären p_4 -Achse gibt.

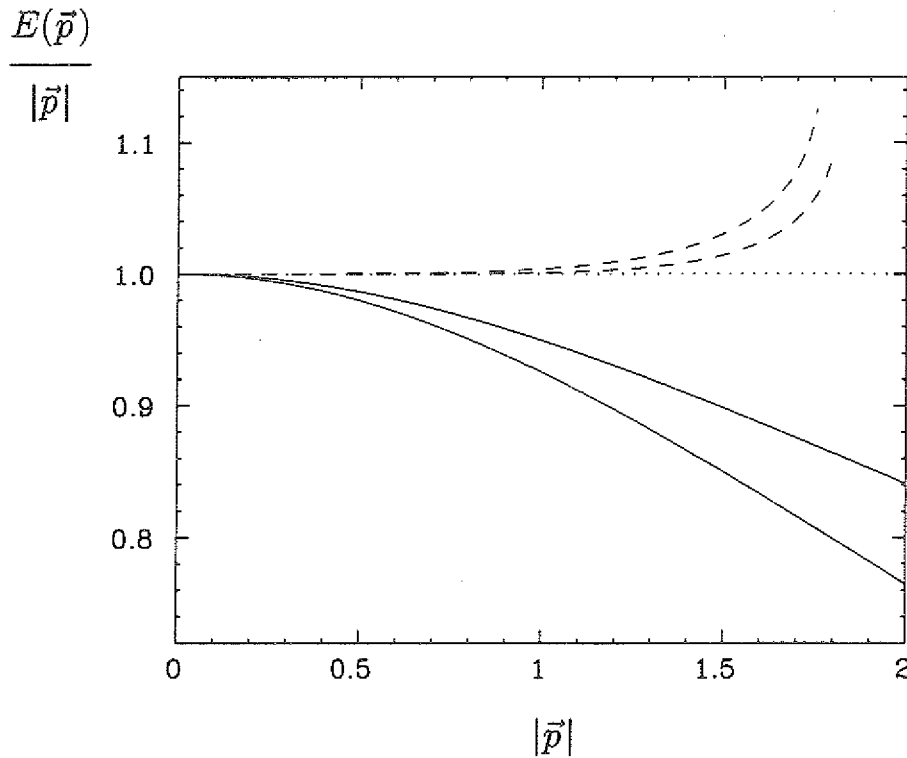


Abbildung 7.2: Der Quotient von Kontinuums- und Gitterdispersionsrelation für die Standard- und die verbesserte Wirkung dargestellt als durchgezogene bzw. gestrichelte Linien. Die beiden Kurven für jede Wirkung fassen den Bereich ein, der maximal bei Variation des Streuwinkels überstrichen wird. Für die verbesserte Wirkung ist $E(\vec{p})$ (7.17) nur bis maximal $|\vec{p}| = 1.815882$ wohldefiniert.

Wird ω auf den Bereich $-1/4 < \omega < 0$ eingeschränkt, so findet man, daß ein physikalischer Pol nur für Impulse $\vec{p}$ existiert, die der folgenden Ungleichung genügen:

$$(1 + 4\omega)^2 + 16\omega \sum_{j=1}^3 (\sin^2(p_j/2) + \omega \sin^2 p_j) \geq 0. \quad (7.16)$$

Die entsprechende Dispersionsrelation lautet dann:

$$\cosh E(\vec{p}) = -\frac{1}{4\omega} + \frac{1}{4\omega} \left[(1 + 4\omega)^2 + 16\omega \sum_{j=1}^3 (\sin^2(p_j/2) + \omega \sin^2 p_j) \right]^{1/2}. \quad (7.17)$$

In Abbildung 7.2 werden die Dispersionsrelationen der Standard- und der verbesserten Wirkung miteinander verglichen.

Wir beschränken uns auf einen Streuwinkel von 90° und wählen $\vec{p}$ und $\vec{p}'$ entlang

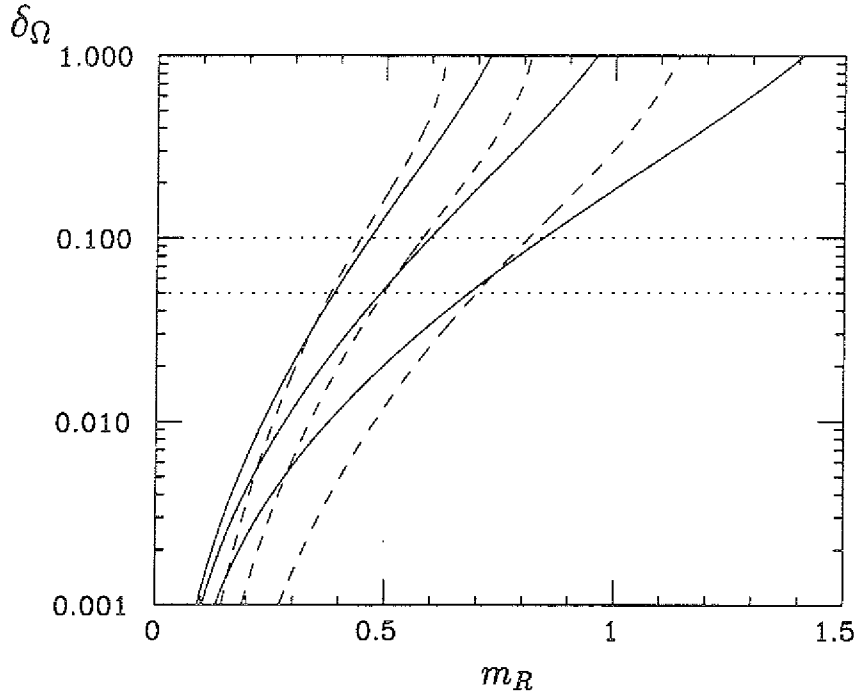


Abbildung 7.3: Die Abweichung δ_Ω zwischen dem differentiellen Gitter- und dem differentiellen Kontinuums-Wirkungsquerschnitt für die 90° -Goldstone-Boson-Streuung als Funktion der renormierten Masse m_R . Die durchgezogenen Linien zeigen den Fall der Standard-Wirkung, die gestrichelten den der *verbesserten* Wirkung jeweils für ein festes Verhältnis $W/(2m_R)$. Von rechts nach links sind hier die Verhältnisse $W/(2m_R) = 1.0, 1.5$ und 2.0 aufgetragen.

der Koordinatenachsen. Abbildung 7.3 zeigt die Abweichung (vgl. Gl. 7.7)

$$\delta_\Omega = \frac{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Gitter}}}{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Kont.}}} - 1 \quad (7.18)$$

zwischen dem differentiellen Gitter- und dem differentiellen Kontinuums-Wirkungsquerschnitt für $N = 4$ als Funktion der renormierten Masse m_R bei festem Verhältnis $R = W/(2m_R)$. Die Abweichung δ_Ω ist für $R = 1.0, 1.5, 2.0$ aufgetragen. Wir beobachten, daß die sogenannte *verbesserte* Wirkung die Abweichung δ_Ω nur für genügend kleine Werte der renormierten Masse m_R „verbessert“. Für größere m_R führt die *verbesserte* Wirkung sogar zu größeren skalenverletzenden Effekten als die Standard-Wirkung. Dieses Verhalten mag seine Ursache in den oben erwähnten unphysikalischen Polen haben.

Wählen wir einen geeigneten Wert der Schwerpunktsenergie (beispielsweise $W = 3m_R$) und lassen wir skalenverletzende Abweichungen δ_Ω von maximal 5% oder 10%

zu, so stellen wir kaum Unterschiede zwischen der Standard- und der *verbesserten* Wirkung fest, was den maximal zulässigen Wert von m_R betrifft. Für beide Wirkungen ist der maximale Wert für m_R (in unserem Beispiel $R = 1.5$, $\delta_\Omega \leq 5 - 10\%$) ungefähr $\rho = 0.5$. Mit den obigen Überlegungen ergibt dies eine obere Schranke für die Higgs-Masse von 680 GeV für die Standard-Wirkung und von 750 GeV für die *verbesserte* Wirkung. Diese Zahlen können mit den Ergebnissen von G. Bhanot, K. Bitar, U. M. Heller und H. Neuberger [84, 85] verglichen werden, die diese Autoren auf F_4 -Gittern erhalten haben. Würde man in ihrem Fall die gleichen Kriterien ($R = 1.5$, $\delta_\Omega \leq 5 - 10\%$) wie auf dem hyperkubischen Gitter anwenden, so erhielte man eine obere Schranke von 580 GeV .

Ausschlaggebend für die Rechnungen auf F_4 -Gittern war die – im Vergleich zum hyperkubischen Gitter – größere Rotationssymmetrie, da jeder Gitterpunkt 24 (anstelle von z.B. 8 bei hyperkubischen Gittern) nächste Nachbarn besitzt. Eine detaillierte Untersuchung der Rotationsinvarianz bei unterschiedlichen Gitterregularisierungen ist von U. Winkler und C.B. Lang durchgeführt worden [89]. Hier will ich nur die Idee dieser Arbeit zusammenfassen.

7.2.2 Verletzung der Rotationssymmetrie

Der zugrundeliegende Ansatz ist wie bei den obigen Betrachtungen, daß verschiedene Gittermodelle an den gleichen physikalischen Eigenschaften, in diesem Fall an der Abweichung von der euklidischen Rotationssymmetrie, geeicht werden sollen. Die Rotationsinvarianz ist deshalb ein wichtiges Kriterium, weil sie am kritischen Punkt vollständig wiederhergestellt sein muß, wenn dort eine Kontinuumstheorie beschrieben werden soll. Als Maß für die Verletzung der Rotationsinvarianz einer Funktion $\tilde{f}(p, \varphi)$, die in der Fourierdarstellung von Koordinaten $p = (p \cos \varphi, p \sin \varphi, 0)$ abhängen soll, wird die Größe

$$\mathcal{N}(p) := \sqrt{\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{\tilde{f}(p, \varphi)}{\tilde{f}(p, 0)} - 1 \right]^2} \quad (7.19)$$

definiert. In [89] wurde $\mathcal{N}$ für den inversen Impulsraumpropagator und die inverse richtungsabhängige Korrelationslänge des Gaußschen Modelles als Funktion von ma berechnet. Für beide Größen läßt sich $\mathcal{N}$ für kleine Impulse entwickeln und für den Spezialfall $p^2 = (ma)^2$ erhält man in führender Ordnung

$$\mathcal{N}(ma) = A \cdot (ma)^{2\gamma} \left[1 + \mathcal{O}(m^2 a^2) \right], \quad (7.20)$$

wobei $\gamma = 1$ für die Standard- und $\gamma = 2$ für die im Sinne Symanziks verbesserte Wirkung ist. Aus der Forderung (7.5) für $\mathcal{Q} = \mathcal{N}$ erhält man folgende Reskalierungsvorschrift

$$\sqrt{\frac{A_{(1)}}{A_{(2)}}} = \frac{(ma^{(2)})^{\gamma^{(2)}}}{(ma^{(1)})^{\gamma^{(1)}}}. \quad (7.21)$$

Nach den Angaben in [89] ist

$$A_{(1)} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{96}, \quad A_{(2)} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{5 \cdot 96}, \quad (7.22)$$

also $A_{(1)}/A_{(2)} = 5$ mit (1) = Standard- und (2) = *verbesserte* Wirkung¹. Das unterschiedliche Potenzverhalten von $\mathcal{N}$ für die beiden untersuchten Gitterwirkungen macht es unmöglich, einen linearen Reskalierungszusammenhang anzugeben². Fordern wir, daß die durch Gl. (7.19) definierten Verletzungen der Rotationssymmetrie der untersuchten Größen kleiner als 0.1% sein sollen, so wäre die obere Schranke in Abbildung 7.1 für die Standard-Wirkung bei $\rho_{(1)} = 0.3$ abzulesen und für die *verbesserte* Wirkung bei $\rho_{(2)} = 0.8$. In diesem Fall würde sich die Kluft zwischen den oberen Schranken für die beiden hier untersuchten Regularisierungen also vergrößern.

Die starken Abweichungen dieses Kriteriums von den Betrachtungen im vorangehenden Teilabschnitt können dahingehend gedeutet werden, daß die Regularisierungsabhängigkeit hier sehr sensitiv von der Definition eines Maßes für die Verletzungen der Drehinvarianz abhängt [89]. Die Untersuchung der Goldstone-Boson-Streuamplitude hingegen ist auch im vollen Standardmodell relevant, falls das Higgs-Teilchen sehr viel schwerer als die $W^\pm$ - und Z -Teilchen ist [84].

7.3 Zusammenfassung zum ersten Teil

Bevor der zweite Teil dieser Arbeit mit der Untersuchung der Instabilität des σ -Teilchens beginnt, seien zunächst die wichtigsten Ergebnisse des ersten Teils zusammengefaßt. Dieser erste Teil der Arbeit hat sich mit folgenden drei Problemstellungen beschäftigt: der Volumenabhängigkeit des Felderwartungswertes Σ und der σ -Masse m_σ , dem Skalenverhalten dieser Größen bei Annäherung an den kritischen Punkt und der Regularisierungsabhängigkeit der oberen Schranke für die Higgs-Masse.

Mit dem Ziel, diese Fragestellungen zu untersuchen, sind Monte-Carlo-Rechnungen in der gebrochenen Phase der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie auf endlichen Gittern durchgeführt worden. Dabei ist sowohl die Standard-Gitter-Wirkung mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung als auch eine im Sinne Symanziks *verbesserte* Wirkung verwendet worden.

Die Konfigurationen sind mittels des Cluster-Algorithmus erzeugt worden, und die sogenannte Histogramm-Methode ermöglichte es, auch Resultate bei κ -Werten zu erhalten, die benachbart zu den eigentlich simulierten Werten κ_0 liegen. Diese beiden Hilfsmittel haben sichergestellt, daß die Daten eine hohe, bis *dato* unerreichte Präzision erhalten haben.

Die Ursache der starken Volumenabhängigkeit in der gebrochenen Phase der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie liegt hauptsächlich in den langreichweitigen Korrelationen der masselosen Goldstone-Bosonen. Mit dieser Arbeit ist gezeigt worden,

¹Für den Ising-Limes der 1komponentigen Φ^4 -Theorie wurden keine gravierenden Abweichungen von diesem Verhalten festgestellt.

²Einen ähnlichen Unterschied im führenden Potenzverhalten besitzt übrigens auch die Abweichung δ_Ω aus der Goldstone-Boson-Streuung [84].

daß der Ansatz mit chiraler Störungstheorie für eine vernünftige Erklärung der Volumenabhängigkeit nicht mehr geeignet ist, sobald die σ -Masse kleiner als ≈ 0.5 wird. Maßgeblich für diese Eigenschaft ist das charakteristische Produkt $m_\sigma L$ von Gitterausdehnung und der σ -Masse. Ist dieses Produkt nicht groß genug, so werden die volumenabhängigen Polarisierungseffekte nicht mehr exponentiell wie $\exp(m_\sigma L)$ unterdrückt. Als Lösung dieses Problems hat sich die Anwendung der renormierten Störungstheorie zur Erklärung der Volumeneffekte erwiesen. Allerdings ist dabei implizit schon die Trivialität der Theorie angenommen worden, die eigentlich erst mit der nicht-perturbativen Monte-Carlo-Rechnung „gezeigt“ werden sollte. Da aber die 1-Schleifen-Näherung der Störungstheorie eine quantitativ präzise Beschreibung der Volumen-Effekte bietet, hat sich die Annahme im nachhinein als richtig bestätigt. Ein weiterer Vorteil des störungstheoretischen Ansatzes ist, daß bei der Bestimmung der σ -Masse m_σ die Instabilität des σ -Teilchens implizit mitberücksichtigt wird.

Bei Annäherung an den kritischen Punkt gehorchen die Observablen den Skalengesetzen aus der Molekularfeld-Näherung mit logarithmischen Korrekturen, die störungstheoretisch bestimmt werden können. Diesbezüglich ist hier das **Skalenverhalten** des Felderwartungswertes Σ und der σ -Masse m_σ untersucht worden. In beiden Fällen konnten die Skalengesetze im wesentlichen bestätigt werden. Allerdings hat sich ein bemerkenswerter Unterschied zwischen dem Modell mit der Standard- und demjenigen mit der *verbesserten* Wirkung herauskristallisiert. Im Fall der *verbesserten* Wirkung ist die asymptotische Form ausreichend zur Beschreibung der Daten gewesen. Der analoge Fit für die Standard-Wirkung führte zu einer von der Voraussage abweichenden logarithmischen Korrektur, so daß eine numerische Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen in der 3-Schleifen-Näherung erforderlich wurde, um schließlich ebenfalls Übereinstimmung mit der Störungstheorie zu erzielen.

Schließlich sind die Daten von Σ , m_σ und der Wellenfunktions-Renormierungskonstanten Z miteinander kombiniert worden, um für beide Gitterregularisierungen das Verhältnis m_σ/F als Funktion von Λ/m_σ aufzutragen. Es gibt mehrere unterschiedliche Kriterien, die **Trivialitätsschranke** für die Higgs-Masse abzulesen, die von der Art der Regularisierung abhängen können. Einige sind hier vorgestellt worden. Die Variation der Werte für die obere Schranke – im vorgestellten Beispiel zwischen 680 GeV und 750 GeV – ist zugleich ein Hinweis auf die Unsicherheit, mit der diese Schranke abzulesen ist. Unter den physikalisch plausiblen Annahmen, daß sich die effektive Φ^4 -Theorie auf dem Gitter regularisieren läßt und dazu keine „hochgezüchteten“ Wirkungen notwendig sind, ergibt sich also eine obere Schranke für die Masse des Higgs-Bosons von 710 ± 40 GeV, bis zu der das Higgs-Boson gefunden sein bzw. die Gültigkeit des minimalen Standard-Modells in Frage gestellt werden muß.

Teil II

Instabile Teilchen

Kapitel 8

Instabile Teilchen im endlichen Volumen

Im zweiten Teil dieser Arbeit wird der von Lüscher festgestellte Zusammenhang zwischen den elastischen Streuamplituden im unendlichen Volumen und dem 2-Teilchen-Energie-Spektrum im endlichen Volumen am Beispiel der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie untersucht. Volumeneffekte dienen also nicht nur zur Kontrolle der Abweichungen von Größen im endlichen Volumen gegenüber ihren *Pendants* im unendlichen Volumen. Vielmehr wird am Beispiel der Untersuchung von Streuphasen gezeigt, daß Größen im endlichen Volumen auf bestimmte Weise Informationen über das System im unendlichen Volumen enthalten. Das endliche Volumen wird gewissermaßen als technisches Hilfsmittel benutzt, die Streuphasen in numerischen Simulationen überhaupt zugänglich zu machen. Die Grundidee hierbei ist, daß die Wechselwirkung massiver Teilchen entweder durch die Streuphasen (im unendlichen Volumen) oder (alternativ) durch das 2-Teilchen-Energiespektrum im endlichen Volumen beschrieben werden kann. Die theoretisch bestimmten Streuphasen erlauben im Prinzip einen direkten Vergleich zum Experiment. Bevor man allerdings hoffen kann, die Streuphasen beispielsweise in der (Gitter-)QCD numerisch bestimmen zu können, müssen zunächst einfachere Modelle – wie beispielsweise die $O(4)$ -symmetrische Φ^4 -Theorie – getestet werden.

Streuprozesse von zwei Teilchen beinhalten mindestens vier asymptotische Zustände. Dabei sind die Endprodukte häufig auch Zerfallsprodukte von Resonanzen (sprich: instabilen Teilchen), die einer gesonderten Untersuchung bedürfen. Resonanzen machen sich in speziellen Eigenschaften der Streuphasen bemerkbar. In der gebrochenen Phase der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie gilt es, die Instabilität des σ -Teilchens zu untersuchen.

Fragestellungen

Numerische Simulationen in der QCD werden auch in den nächsten Jahren auf Gitter beschränkt sein, deren physikalische Ausdehnung L kleiner als 10 fm sein wird (falls eine Gitterkonstante von ca. $a = 0.1\text{ fm}$ vorausgesetzt wird). Für eine solche Box mit periodischen Randbedingungen, deren Ausmaße im Bereich einiger Femtometer liegen, hat Bjorken den Begriff „Femto-Universum“ eingeführt [94].

Das Energiespektrum im endlichen Volumen ist diskret und ein Impulsquant in einer endlichen periodischen Box der Kantenlänge L hat den Wert:

$$\Delta p = \frac{2\pi}{L} = \frac{1240 \text{ MeV}}{L [\text{fm}]} \quad (8.1)$$

Die Energieaufspaltung ist unter den erwarteten Umständen mit einigen 100 MeV relativ groß. Unter diesem Aspekt sind drei Fragen wichtig [106, 110]:

1. Wie hängen die Massen stabiler Teilchen (beispielsweise der Hadronen) von der Ausdehnung L der Box ab?
2. Kann man Streuamplituden überhaupt im endlichen Volumen berechnen?
3. Und falls die zweite Frage bejaht werden kann: Geben die (im „Femto-Universum“ berechneten) Streuphasen auch Hinweise auf instabile Teilchen?

In jüngster Zeit gelang es M. Lüscher, diese Fragen eingehend zu analysieren [101–104]. Auf die erste Frage wurde in Kapitel 5 ausführlich eingegangen. Im Zusammenhang mit der Diskussion der weiteren Fragen ist nur von Belang, daß die Volumenabhängigkeit der Massen stabiler Teilchen aufgrund von Polarisierungseffekten (Stichwort: „virtueller Teilchenaustausch um die Welt“) exponentiell proportional zu e^{-mL} abfällt (s. Diagramm B auf Seite 60).

Die zweite Frage betreffend hat M. Lüscher gezeigt, daß das Spektrum einer massiven Quantenfeldtheorie unterhalb der inelastischen Schwelle durch eine stationäre, effektive Schrödinger-Gleichung (mit einem energieabhängigen Potential) beschrieben wird. Daraus hat er eine Beziehung zwischen dem (Zwei-)Teilchen-Spektrum im endlichen Volumen (mit periodischen Randbedingungen) und den im unendlichen Volumen definierten elastischen Streuphasen abgeleitet [103]. Da die 2-Teilchen-Energie-Niveaus mit Monte-Carlo-Methoden berechnet werden können, eröffnet diese Beziehung die Möglichkeit, Streuphasen aus numerischen Simulationen auf endlichen Gittern zu extrahieren. Streulängen sind in diesem Zusammenhang schon vor einigen Jahren von C. Frick et al. aus der Volumenabhängigkeit der niedrigstens 2-Teilchen-Energie-Niveaus gemessen worden [50, 96]. Eine Bestätigung der Resultate gelang J. Nishimura [109]. Eine entsprechende Formel in zwei Dimensionen hat M. Lüscher selbst gemeinsam mit U. Wolff benutzt, um die Streuphasen im $O(3)$ -symmetrischen nichtlinearen σ -Modell zu bestimmen [107].

Auch die dritte Frage kann für einfache Testmodelle positiv beantwortet werden [98, 112, 108, 97]. Das Problem instabiler Teilchen ist schon in dem 2-Kanal-Resonanz-Modell von U. Wiese [112] und der eher phänomenologischen Arbeit von C. Michael [108] aufgegriffen worden. C.R. Gattlinger und C.B. Lang haben in einem einfachen zweidimensionalen Modell von zwei gekoppelten Ising-Systemen auch Resonanzstreuung beobachtet [97]. Mit der vorliegenden Arbeit [125] ist es gelungen, die Resonanzmasse m_σ und die Zerfallsbreite Γ_σ des σ -Teilchens in der gebrochenen Phase des 4dimensionalen $O(4)$ -symmetrischen σ -Modelles mit großer Genauigkeit und in voller Konsistenz mit störungstheoretischen Vorhersagen zu bestimmen.

8.1 Heuristisches zu Volumeneffekten

Zunächst wird anhand einfacher heuristischer Überlegungen verdeutlicht, welche Effekte des endlichen Volumens wir erwarten, wenn wir eine Quantenfeldtheorie mit nichtverschwindenden Massen der Teilchen in einer räumlichen L^3 -Box mit periodischen Randbedingungen (einem dreidimensionalen Torus) betrachten [101, 102]. Die zeitliche Ausdehnung T sei immer größer als die räumlichen Ausmaße L ; idealerweise wäre $T = \infty$. Da die räumlichen Ausmaße endlich sind, ist das Spektrum des Hamilton-Operators diskret, und die Energieeigenwerte sind auf dynamische Weise L -abhängig. Für große Volumina erwartet man unterscheidbare Impuls-Null-Zustände des Hamilton-Operators, die als 1-Teilchen-Ruhezustände interpretiert werden können. Die zugehörigen Energiewerte $M(L)$ sind ungefähr den Ruhemassen m im unendlichen Volumen gleich.

Wieso hängen sie überhaupt von L ab? – Die Vorstellung dabei ist, daß die „punktartigen Teilchen“ von einer Wolke virtueller Teilchen umgeben sind, deren Ausmaße der Comptonwellenlänge des leichtesten Teilchens im Spektrum entspricht (s. Kap. 5). Volumeneffekte entstehen durch das Zwängen dieser Wolke in ein endliches Volumen, oder anders ausgedrückt durch „virtuellen Teilchenaustausch einmal um die Welt“. In massiven Theorien wird dies durch ein Diagramm der Art [101]

$$m - M(L) \sim \text{---} \bigcirc \text{---} \sim \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{e^{ipz}}{(p^2 + m^2)} \sim e^{-m|z|} \quad (8.2)$$

beschrieben, wobei $|z| = nL$ mit $n = 1, 2, \dots$. Das bedeutet, diese Polarisierungseffekte sind mindestens wie e^{-mL} unterdrückt, da das Teilchen eine Reise über einen klassisch verbotenen Pfad der Länge L unternehmen muß. Daß diese Effekte selbst in Theorien mit masselosen Teilchen kontrolliert werden können, haben wir in Kapitel 5 gesehen.

Als nächstes sind wir an den Energiezuständen *zweier* ungebundener **stabiler** Teilchen im endlichen Volumen interessiert. Aufgrund des endlichen Volumens ist das Spektrum der zwei Teilchen mit Gesamtimpuls Null wieder diskret. Zwei freie Bosonen mit den physikalischen Massen m besitzen eine 2-Teilchen-Energie $W = 2\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$, wobei ihr relativer Impuls $\vec{p} = (2\pi/L)\vec{n}$ ($\vec{n} \in \mathbb{Z}^3$) ist. In dimensionslosen Größen ausgedrückt,

$$\frac{W}{m} = 2\sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m^2}}, \quad \vec{p} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}, \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3, \quad (8.3)$$

veranschaulicht dies Abbildung 8.1. Für nicht allzu große Volumina hat man wohlseparierte Energieniveaus. Für unendliches Volumen verschwindet der Abstand zwischen den Energieniveaus und ihre Dichte wächst proportional zum räumlichen Volumen an, so daß wir im unendlichen Volumen ein kontinuierliches Energiespektrum erhalten. Wir wollen die Korrekturen zu diesen freien Energieniveaus durch kurzreichweitige 2-Teilchen-Wechselwirkungen größenordnungsmäßig abschätzen. Die Wahrscheinlichkeit der Teilchen, sich innerhalb des Wechselwirkungsabstandes zu treffen,

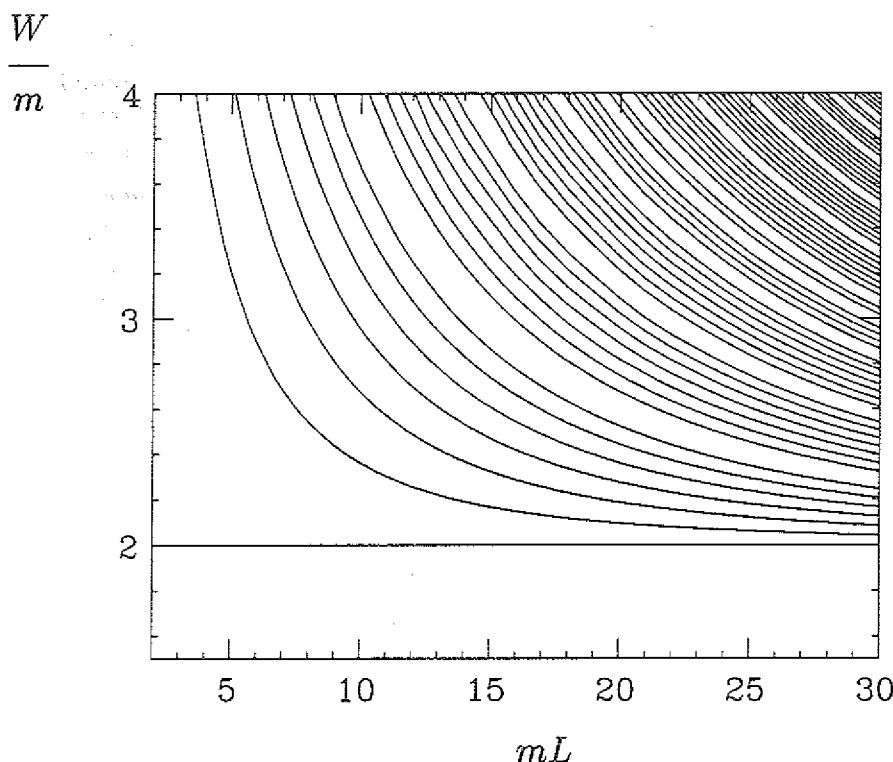


Abbildung 8.1: Das freie 2-Teilchen-Energie-Spektrum gemäß Gl. (8.3). Die Dichte der Energieniveaus nimmt mit steigendem Volumen zu.

ist also $\sim 1/L^3$. Folglich kommen die führenden Korrekturen zum freien 2-Teilchen-Energiespektrum der Ordnung $1/L^3$ von *realen* Streuprozessen im Gegensatz zu den exponentiell abfallenden Polarisierungseffekten durch den *virtuellen* Teilchenaustausch „um die Welt“. Dieses einfache heuristische Bild bricht jedoch zusammen, sobald die Energien die inelastische Schwelle zu den Vielteilchenprozessen überschritten haben oder zusätzlich auch instabile Teilchen auftreten können.

8.2 Streuphasen und Zwei-Teilchen-Zustände

Um 2-Teilchen-Streuung im endlichen (räumlichen) Volumen zu untersuchen betrachtet M. Lüscher zunächst ein nichtrelativistisches Modell zweier Bosonen in einer Box mit periodischen Randbedingungen. Ist die Ausdehnung der Box – und das ist eine wesentliche Voraussetzung – größer als der Wechselwirkungsbereich, so ist das Energiespektrum durch die Streuphasen bei den entsprechenden Energiewerten bestimmt. Für Energieniveaus unterhalb der inelastischen Schwelle kann dieses quantenmechanische Resultat (bis auf Terme, die exponentiell mit der Ausdehnung L abfallen) auf eine massive Quantenfeldtheorie übertragen werden. Da die ganze Argumentationskette nur funktioniert, wenn keine masselosen Teilchen im Spektrum vorkommen, müssen in dem hier untersuchten Modell die Goldstone-Bosonen massiv

gemacht werden. Aus diesem Grund wird die $O(4)$ -Symmetrie in der Wirkung (3.3) des nichtlinearen σ -Modells ($\lambda = \infty$ in Gl. (3.3)) zum Zwecke des Studiums der σ -Resonanz in dieser Arbeit durch eine endliche äußere Quelle $J \neq 0$ explizit gebrochen (vgl. Gl. (3.12) von Seite 29) auf dem Baumgraphen-Niveau).

8.2.1 Die Formulierung in 1+1 Dimensionen

Zunächst soll an einem einfachen quantenmechanischen 2dimensionalen Modell die Grundidee, der Zusammenhang zwischen den Streuphasen im *unendlichen* Volumen und dem 2-Teilchen-Energiespektrum im *endlichen* Volumen, erläutert werden [102, 107].

Ein quantenmechanisches Modell im unendlichen Volumen

Zunächst untersuchen wir die Streuung von zwei nichtrelativistischen Bosonen gleicher Masse m mit Gesamtimpuls Null im unendlichen Volumen. Die Schrödinger-Wellenfunktion dieser beiden spinlosen Teilchen an den Orten x und y ist nur von dem Abstand der Teilchen $z = x - y$ abhängig und aufgrund der Bose-Symmetrie symmetrisch unter Vertauschung von x und y . Die stationäre Schrödinger-Gleichung für die beiden sich auf einer Geraden bewegend Teilchen besitzt dann folgende Gestalt

$$\left\{ -\frac{1}{m}\partial_z^2 + V(|z|) \right\} \psi(z) = E\psi(z), \quad \psi(-z) = \psi(z). \quad (8.4)$$

Es wird vorausgesetzt, daß das Wechselwirkungspotential $V(|z|)$ kurzreichweitig ist und die Differentialgleichung (8.4) für jede Energie E nur eine linear unabhängige Lösung $\psi_E(z)$ besitzt. Insbesondere beschreibt $\psi_E(z)$ für Energien $E = k^2/m$ ($k \geq 0$) einen stationären Streuzustand, und die Wellenfunktion kann nach Einführung einer Streuphase $\delta(k)$ in folgender Weise normiert werden:

$$\psi_E(z) \Big|_{|z| \rightarrow \infty} = \cos(k|z| + \delta(k)). \quad (8.5)$$

Das quantenmechanische Modell im endlichen Volumen

Falls die Teilchen auf einem Kreis des Umfangs L eingeschlossen sind, ist die Wellenfunktion $\psi(z)$ periodisch mit der Periode L . Für Streuzustände ist die stationäre Schrödinger-Gleichung für das *endliche* Volumen die gleiche wie im unendlichen Volumen, mit der Ausnahme, daß jetzt auch Wechselwirkungen „um die Welt“ mitberücksichtigt werden müssen. Falls L jedoch wesentlich größer als der Wechselwirkungsbereich ist, können die Wechselwirkungen „um die Welt“ vernachlässigt werden, und die Lösung der Schrödinger-Gleichung bleibt dieselbe wie im unendlichen Volumen. Es müssen jedoch die periodischen Randbedingungen an die Lösung $\psi_E(z)$ berücksichtigt werden. Mit der Forderung

$$\psi'_E\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi'_E\left(\frac{L}{2}\right) \quad (8.6)$$

und mit Hilfe der Gestalt der Lösung (8.5), die außerhalb des Wechselwirkungsbereiches auch im endlichen Volumen gilt, ergibt sich die Bedingung $kL + 2\delta(k) = 0 \pmod{2\pi}$. Anders ausgedrückt: um die Periodizität der Wellenfunktion für eine

Lösung k zu sichern, müssen sich die kinematische Phasenverschiebung kL der freien Welle auf dem Abstand L und die Phasenverschiebung $\delta(k)$ aus der Streuung der Teilchen (modulo 2π) gerade kompensieren. D.h. für ein gegebenes Wechselwirkungspotential hat man in einem Volumen L eine diskrete Menge von Energieeigenwerten $E = k_\nu^2/m$, $\nu = 0, 1, 2, \dots$, wobei die Impulse k_ν Lösungen der Quantisierungsbedingung

$$\delta(k_\nu) = -\frac{k_\nu L}{2} + \nu\pi, \quad (8.7)$$

$\nu = 0, 1, 2, \dots$ sein müssen.

Die Übertragung auf massive Quantenfeldtheorien

Wenn man die nichtrelativistische Energie-Impuls-Beziehung $E = k_\nu^2/m$ durch die relativistische Formel

$$W_\nu = 2\sqrt{m^2 + k_\nu^2} \quad (8.8)$$

ersetzt, läßt sich dieses Resultat unter folgenden drei Voraussetzungen auf eine massive Quantenfeldtheorie übertragen [102, 107]:

- Die Zwei-Teilchen-Zustände im endlichen Volumen besitzen Quantenzahlen und Energien, so daß eine Mischung mit Vielteilchenzuständen unterbunden wird. In unserem Modell ist diese Bedingung für Energien unterhalb der inelastischen Schwelle $W = 4m$ gesichert.
- Die Ausdehnung L muß wesentlich größer als der Wechselwirkungsbereich sein, damit die Lösung außerhalb des Wechselwirkungsbereiches durch freie Lösungen (ebene Wellen) beschrieben wird. Übertragen auf massive Quantenfeldtheorien bedeutet dies, daß L groß genug sein muß, um die in Abschn. 8.1 erwähnten Polarisierungseffekte exponentiell mit e^{-mL} zu unterdrücken.
- Wird die Theorie auf einem euklidischen Gitter formuliert, so ergeben sich weitere Korrekturen zu den Gleichungen (8.8) und (8.7), die mit einer Potenz des Gitterabstandes a verschwinden.

Interpretation

Kommen wir zur Interpretation der Gleichungen (8.8) und (8.7). Es ergeben sich zwei unterschiedliche Lesarten:

- ⇒ Ist perturbativ, analytisch oder experimentell der Verlauf der Streuphase $\delta(k)$ gegeben, dann bestimmt die (beispielsweise graphische) Auflösung von $k_\nu L/2 = -\delta(k_\nu) + \nu\pi$ (s. Gl. (8.7)) nach k_ν das Zwei-Teilchen-Energiespektrum $W_\nu = 2\sqrt{m^2 + k_\nu^2}$.

- ⊕ Berechnet man umgekehrt (z.B. mittels Monte-Carlo-Simulationen) das 2-Teilchen-Energiespektrum W_ν und bestimmt die zugehörigen Impulse $k_\nu = \sqrt{(W_\nu/2)^2 - m^2}$ (Gl. (8.8)), dann ist die Streuphase für diesen speziellen Impulswert durch $\delta(k_\nu) = -k_\nu L/2 \bmod \pi$ gegeben. Da man numerisch im endlichen Volumen nur ein diskretes Energiespektrum ermitteln kann, erhält man $\delta(k)$ entsprechend nur für eine ganz diskrete Anzahl von Stützstellen k_ν . Um die Streuphasen in einem ganzen Bereich bestimmen zu können, muß diese Prozedur also für andere Werte von mL wiederholt werden.

Das Szenario für einen dreidimensionalen Raum ist – wie wir im folgenden Abschnitt sehen werden – zwar komplizierter, da die Beziehungen (8.8) und (8.7) durch entsprechende dreidimensionale Relationen zu ersetzen sind, doch die Argumentationskette kann (im wesentlichen) übernommen werden.

8.2.2 Die Formulierung in 3+1 Dimensionen

Bei der Übertragung des o.a. Zusammenhanges zwischen den Streuphasen und dem 2-Teilchen-Energiespektrum auf vier Raum-Zeit-Dimensionen treten folgende Komplikationen auf [103]: Die Streuamplitude wird (im unendlichen Volumen) nach Partialwellen entwickelt und entsprechend die Energieeigenwerte (im endlichen Volumen) nach Drehimpulseigenzuständen zerlegt. Die Rotationsinvarianz ist durch das endliche räumliche Volumen der 3dimensionalen Box der Größe L^3 gebrochen, und die periodischen Randbedingungen als Folge der kubischen Geometrie dieser Box müssen berücksichtigt werden. Deswegen müssen die 2-Teilchen-Zustände nicht nur in eine Drehimpulsdarstellung gebracht, sondern auch nach irreduziblen Darstellungen der kubischen Gruppe zerlegt werden. Das Zwei-Teilchen-Energiespektrum hängt folglich von allen Streuphasen δ_l für alle Drehimpulszahlen l ab, die nicht durch die kubische Symmetrie der Zustände ausgeschlossen sind.

Ein quantenmechanisches Modell im unendlichen Volumen

Wir betrachten wieder ein System zweier Bosonen („Pionen“) der Masse m_π mit einem Gesamtimpuls Null, die durch ein kurzreichweitiges Potential wechselwirken. Die Schrödingersche Wellenfunktion dieser beiden Teilchen an den Orten $\vec{x}$ und $\vec{y}$ ist nur vom Abstandsvektor $\vec{r} = \vec{x} - \vec{y}$ der Teilchen abhängig, und der entsprechende Hamilton-Operator lautet:

$$H = -\frac{1}{m_\pi} \Delta + V(r), \quad r = |\vec{r}| \quad (8.9)$$

wobei vorausgesetzt wird, daß das Wechselwirkungspotential $V(r)$ außerhalb der endlichen Reichweite R verschwindet: $V(r) = 0$ für $r > R$. Die stationären Streuzustände im unendlichen Volumen werden durch die Lösungen $\psi(\vec{r})$ der zugehörigen stationären Schrödinger-Gleichung

$$H\psi = E\psi, \quad E = \frac{k^2}{m_\pi} \quad \text{mit} \quad k > 0 \quad (8.10)$$

beschrieben. Analog zu Gl. (8.5) interessieren wir uns nur für die Wellenfunktion außerhalb des Wechselwirkungsbereiches (d.h. für $r > R$). Dort nimmt $\psi(\vec{r})$ nach Kugelfunktionen zerlegt folgende Gestalt an:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \psi_{lm}(r)$$

mit $\psi_{lm}(r) = b_{lm} \left\{ j_l(kr) + \tan \delta_l(k) n_l(kr) \right\},$ (8.11)

wobei der Radialanteil $\psi_{lm}(r)$ nach den sphärischen Besselfunktionen $j_l(kr)$ und $n_l(kr)$ entwickelt werden kann [119]. Der relative Koeffizient zwischen den beiden Besselfunktionen kann durch die Streuphase $\delta_l(k)$ zum Drehimpuls l ausgedrückt werden.

Das quantenmechanische Modell im endlichen Volumen

Falls die zwei Teilchen in einer dreidimensionalen endlichen Box der Größe L^3 eingeschlossen sind, müssen die periodischen Randbedingungen und die kubische Geometrie der Box berücksichtigt werden. Für Streuzustände ist die stationäre Schrödinger-Gleichung für das endliche Volumen die gleiche wie im unendlichen Volumen, mit der Ausnahme, daß jetzt auch Wechselwirkungen „um die Welt“ mitberücksichtigt werden müssen. Falls die Ausdehnung L jedoch größer als der Wechselwirkungsbereich $2R$ des Potentials ist, sind die Lösungen der Schrödinger-Gleichung im Außenbereich $R < r < L/2$ dieselben wie im unendlichen Volumen (s. Gl. (8.11)). Die periodischen Randbedingungen werden dadurch berücksichtigt, daß die Eigenfunktionen $\psi(\vec{r})$ zum Hamiltonoperator (8.11) gleichzeitig glatte, periodische Lösungen der Helmholtz-Gleichung

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (8.12)$$

im Außenbereich ($R < r < L/2$) sein müssen. Von M. Lüscher ist dieses Problem so gelöst worden, daß er zunächst alle periodischen (singulären) Lösungen der Helmholtz-Gleichung charakterisiert nach Drehimpulsquantenzahlen (und Darstellungen der kubischen Gruppe) gesucht und anschließend *quasi* durch Koeffizientenvergleich mit Gl. (8.11) die Bedingung zwischen den Streuphasen $\delta_l(k)$ und den Zwei-Teilchen-Energieniveaus abgeleitet hat [103].

Ist das Potential kurzreichweitig genug ($R \ll L/2$), so können alle Beiträge mit $l \neq 0$ vernachlässigt werden. Sofern $(k \neq (2\pi/L)|\vec{n}|, \forall \vec{n} \in \mathbb{Z}^3)$ gilt, lautet in diesem Fall die offensichtlich periodische Lösung der Helmholtz-Gleichung (8.12):

$$G(\vec{r}, k^2) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{p} \in (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z})^3} \frac{e^{i\vec{p}\vec{r}}}{\vec{p}^2 - k^2}. \quad (8.13)$$

Diese Funktion kann nach Kugelfunktionen und Besselfunktionen entwickelt werden:

$$G(\vec{r}, k^2) = \frac{Z_{00}(1; q^2)}{2\pi^{3/2}L} \left(j_0(kr) + \frac{q\pi^{3/2}}{Z_{00}(1; q^2)} n_0(kr) \right) + \sum_{l>0, m} \dots, \quad q = \frac{kL}{2\pi}. \quad (8.14)$$

Die hierbei eingeführte Zeta-Funktion $Z_{00}(1; q^2)$ ist durch analytische Fortsetzung von

$$Z_{00}(s; q^2) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} (\vec{n}^2 - q^2)^{-s} \quad (8.15)$$

in s definiert. Für $s=1$ ist die Zeta-Funktion in Abbildung E.1 dargestellt. Sie kann auch für negative Werte von q^2 berechnet werden. Hilfestellungen zur numerischen Berechnung sind in Anhang E gegeben [103, 105].

Durch Koeffizientenvergleich mit der Lösung (8.11)

$$\psi(\vec{r}) = \frac{b_{00}}{\sqrt{4\pi}} \left(j_0(kr) + \tan \delta_0(k) n_0(kr) \right) + \sum_{l>0, m} \dots \quad (8.16)$$

ergibt sich die der Bedingung (8.7) entsprechende Beziehung in drei Dimensionen:

$$\tan \delta_0(k) = \frac{q\pi^{3/2}}{Z_{00}(1; q^2)}, \quad q = \frac{kL}{2\pi}, \quad (8.17)$$

für den Zusammenhang zwischen den Streuphasen $\delta_0(k)$ und dem nichtrelativistischen 2-Teilchen-Energiespektrum $E = k^2/m$ im endlichen Volumen.

Durch Zerlegung der Drehimpulseigenzustände nach den irreduziblen Darstellungen der speziellen kubischen Gruppe $SO(3, \mathbb{Z})$ (A_1, A_2, E, T_1, T_2) und der Parität $P = \pm 1$, sieht man, daß beispielsweise zum Energiespektrum im Unterraum der kubisch invarianten Zustände (dem A_1^+ -Sektor) nur die Streuphasen δ_l mit Drehimpulzzahlen $l = 0, 4, 6, \dots$ beitragen können. Für Eigenzustände in der Vektordarstellung T_1 der $O(3, \mathbb{Z})$ ist die Streuphase δ_0 in Gleichung (8.17) einfach durch δ_1 zu ersetzen. Für negative Energien $E < 0$, d.h. gebundene Zustände, ist die Bedingung (8.17) ebenfalls gültig, sofern zu rein imaginären Werten von $k \rightarrow ik'$ analytisch fortgesetzt wird.

Setzt man voraus, daß die Streuphasen $\delta_l(k)$ für $l = 4, 6, \dots$ verschwinden, so gibt es außer den Lösungen von Gl. (8.17) für $q^2 \geq 9$ auch noch Überlagerungen von ebenen Wellen als Lösungen zur Helmholtzgleichung [103]. Die allgemeine Herleitung der Beziehung (8.17) für die anderen Symmetrie-Sektoren und Spezialfälle findet man in Lüscher's Veröffentlichung¹ [103]. Dort wird auch gezeigt, daß die niedrigsten Energieniveaus bis auf Korrekturen durch die Streuphasen δ_l ($l \geq 4$), die von der Ordnung $\mathcal{O}(L^{-9})$ (bzw. $\mathcal{O}(L^{-11})$) sind, exakt durch die Gleichung (8.17) gegeben sind. Dies bestätigt die Dominanz der s -Wellen-Streuphasen in massiven Quantenfeldtheorien bei niedrigen Energien.

¹P. van Baal hat in einem Konferenzbeitrag eine alternative Herleitung der Gleichung (8.17) skizziert [92].

Die Übertragung auf massive Quantenfeldtheorien

Dieses Resultat läßt sich unter den gleichen Voraussetzungen wie jenes in 1 + 1 Dimensionen auf eine massive Quantenfeldtheorie übertragen: Die 2-Teilchen-Zustände im elastischen Bereich werden durch die Schwerpunktsenergie W und den räumlichen Impuls $\vec{k}$ charakterisiert, zwischen denen die relativistische Energie-Impuls-Beziehung gilt (vgl. Gl.(8.8)):

$$W = 2\sqrt{m_\pi^2 + \vec{k}^2}, \quad k = |\vec{k}|. \quad (8.18)$$

Die Wertebereiche der Größen W und k liegen im elastischen Bereich bei:

$$2m_\pi < W < 4m_\pi \quad \Leftrightarrow \quad 0 < k/m_\pi < \sqrt{3}. \quad (8.19)$$

Die 2-Teilchenzustände lassen sich bezüglich irreduzibler Darstellungen der kubischen Gruppe klassifizieren. Ihr diskretes Energiespektrum W_ν , $\nu = 0, 1, 2, \dots$, ist mit den Streuphasen δ_l (mit Drehimpuls l) verknüpft, die durch die kubische Symmetrie der Zustände erlaubt ist.

Im hier untersuchten Unterraum der kubisch invarianten Zustände (dem A_1^+ -Sektor der $O(3, \mathbb{Z})$) tragen nur die Streuphasen δ_l mit Drehimpulszahlen $l = 0, 4, 6, \dots$ bei. Ist das Potential kurzreichweitig – und das ist gleichbedeutend damit, daß die Teilchen massiv genug sind – so können alle Beiträge mit $l \neq 0$ vernachlässigt werden. Ein Energiewert W_ν gehört dann zum 2-Teilchen-Spektrum, wenn der zugehörige Impulsbetrag² $k_\nu = \sqrt{(W_\nu/2)^2 - m_\pi^2}$ Lösung der Gleichung

$$\delta_0(k_\nu) = -\phi\left(\frac{k_\nu L}{2\pi}\right) + \nu\pi \quad (8.20)$$

ist (vgl. Gl.(8.7)). Die stetige Funktion $\phi(q)$ ist durch

$$\tan(-\phi(q)) = \frac{q\pi^{3/2}}{\mathcal{Z}_{00}(1; q^2)}, \quad \phi(0) = 0 \quad (8.21)$$

definiert und wird in Abbildung 8.2 gezeigt. Zur Zeta-Funktion (8.15) siehe auch Abbildung E.1 und Anhang E. Dieses Ergebnis ist nur für $q^2 < 9$ exakt (was in den zu dieser Arbeit durchgeführten Monte-Carlo-Simulationen stets erfüllt ist) und erfordert die Voraussetzung, daß Polarisations- und skalenverletzende Effekte vernachlässigbar sind (vgl. Abschn. 8.2.1 und [103]).

²Der Index ν nummeriert die Energieniveaus und ist nicht mit der Angabe einer räumlichen Komponente zu verwechseln.

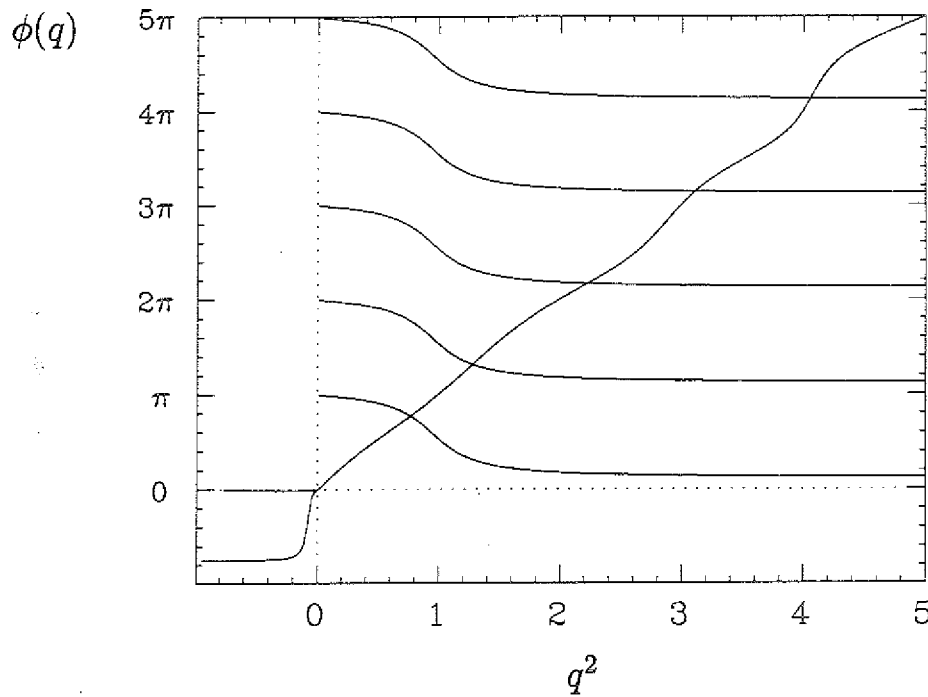


Abbildung 8.2: Die Funktionen $\phi(q)$ sowie $\nu\pi - \delta_0(k_\nu)$ und die graphische Lösung der Gleichung (8.20) für festes L . $\delta_0(k_\nu)$ ist modellspezifisch und wird hier störungstheoretisch gemäß Gleichung (8.32) berechnet.

Interpretation

Die beiden Richtungen, in denen die Gleichung (8.20), die den Zusammenhang zwischen den Streuphasen im unendlichen Volumen und dem 2-Teilchen-Energiespektrum im endlichen Volumen beschreibt, gelesen werden kann, wurden schon in Abschnitt 8.2.1 vorgestellt.

In Kapitel 9 wird diskutiert, auf welche Weise das 2-Teilchen-Energie-Spektrum in der gebrochenen Phase der $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie gemessen werden kann. In Kapitel 10 werden daraus die Streuphasen berechnet und die σ -Resonanz vermessen. Dazu berechnen wir die 2-Teilchen-Impulse k_ν aus den entsprechenden Energie-Niveaus W_ν für eine gegebene Gitterausdehnung L . Dann kann die Streuphase $\delta_0(k_\nu)$ direkt aus Gleichung (8.20) als Funktionswert $-\phi(k_\nu L/2\pi) \bmod \pi$ abgelesen werden. Um die Impulsabhängigkeit der Streuphase über einen ganzen Bereich ablesen zu können, muß die räumliche Ausdehnung L des Gitters in den Simulationen variiert werden.

Die Formel (8.20) kann umgekehrt auch dazu benutzt werden, die Energie-Niveaus für gegebene Streuphasen zu bestimmen. In Abschnitt 8.3 wird mit Hilfe von störungstheoretischen Berechnungen für die Streuphasen in der gebrochenen Phase der $O(4)$ - Φ^4 -Theorie das 2-Teilchen-Energiespektrum vorhergesagt [103].

Asymptotische Lösungen

Eine einfache Anwendung der Bedingung (8.20) ist die Herleitung der Entwicklung für große Ausdehnungen L [102]. Für kleine Impulsbeträge k (dies entspricht großen Volumina) ist die Streuphase δ_0 durch die Entwicklung

$$\tan \delta_0(k) = a_0 k + b_0 k^3 + \mathcal{O}(k^5) \quad (8.22)$$

gegeben, wobei a_0 Streulänge heißt. Die Lösungen von Gleichung (8.20) werden folglich durch eine Entwicklung von $\phi(q) \approx \nu\pi$ gut wiedergegeben. Die Funktion $\phi(q)$ nimmt ganzzahlige Vielfache von π für $q^2 \in S_\infty = \{ \nu \in \mathbb{N}_0 \mid \exists \vec{n} \in \mathbb{Z}^3 : \nu = |\vec{n}|^2 \}$ an (s. Gl. (E.10)).

Mit Hilfe der asymptotischen Entwicklung der Zeta-Funktion $Z_{00}(1; q^2)$ (E.8) um ihre Singularitäten $q^2 \approx \nu$, bei der die einzelnen Koeffizienten durch die subtrahierte Zeta-Funktion $Z_{00}(s; q^2)$ und die Vielfachheiten w_ν ausgedrückt werden können (s. Anhang E), erhält man folgende asymptotischen Lösungen k der Gleichung (8.20) [103]:

$$q^2 = \frac{k^2 L^2}{4\pi^2} = \nu - \frac{c_0 a_\nu}{L} \left\{ 1 + \frac{c_1 a_\nu}{L} + \frac{c_2 a_\nu^2}{L^2} \right\} + \mathcal{O}(L^{-4}) \quad (8.23)$$

mit

$$c_0 = \frac{w_\nu}{\pi}, \quad c_1 = \frac{Z_{00}(1; \nu)}{\pi}, \quad c_2 = \frac{Z_{00}(1; \nu)^2 - w_\nu Z_{00}(2; \nu)}{\pi^2}. \quad (8.24)$$

und $a_\nu = (\tan \delta_0(k)/k)|_{k=2\pi\sqrt{\nu}/L}$. Für das niedrigste Energieniveau $\nu=0$ ist a_ν identisch mit der Streulänge a_0 . Ist die Streulänge a_0 positiv (wie in dem hier untersuchten Modell für den Isospin-0-Kanal der gebrochenen Phase der $O(4)$ - Φ^4 -Theorie), so sind die Lösungen (8.23) rein imaginäre Impulse k . Das niedrigste Energieniveau beschreibt einen entsprechenden stationären 2-Pion-Streuzustand. Die numerischen Werte der Konstanten (8.24) sind für $\nu=0$: $c_0 = 1/\pi$, $c_1 = -2.837298$ und $c_2 = 6.375183$ (vgl. Tabelle E.1).

Im Bereich der Resonanz wird die Lösung aus der Entwicklung der Zeta-Funktion um eine ihrer Nullstellen $q_{(0)}$ gewonnen:

$$\delta_0(k) - \frac{\pi}{2} \approx \frac{Z_{00}(1; q^2)}{\pi^{3/2} q}, \quad q \approx q_{(0)}. \quad (8.25)$$

Die Nullstellen der Zeta-Funktion $Z_{00}(1; q^2)$ sind in Tabelle E.2 aufgelistet.

8.2.3 Zur Formulierung in anderen Dimensionen

In $2+1$ Raum-Zeit-Dimensionen sind die Streuphasen eines Meson-Meson Systems in der Gitter-QED von H.R. Fiebig und R.M. Woloshyn berechnet worden [95]. Auch hier ist die Rotationssymmetrie durch die Geometrie des Quadrates L^2 gebrochen, und das Spektrum muß nach den irreduziblen Darstellungen (A_1, A_2, B_1, B_2, E) der 2dimensionalen kubischen Symmetriegruppe $O(2, \mathbb{Z})$ klassifiziert werden. Es kann wieder eine Bedingung ähnlich zu (8.7) und (8.20) hergeleitet werden [95].

Die Kurzreichweitigkeit des Potentials bzw. eine Quantenfeldtheorie massiver Teilchen vorausgesetzt, ist die Beziehung zwischen den Streuphasen im unendlichen Volumen und dem Zwei-Teilchen-Energiespektrum im endlichen Volumen in beliebigen Dimensionen d maßgeblich mit dem Problem verknüpft, alle periodischen (singulären) Lösungen der Helmholtz-Gleichung (8.12) zu finden [103].

Von C. Itzykson ist das (freie) Energiespektrum³ des d -dimensionalen Laplace-Operators in einer kompakten Box, die von einer endlichen Anzahl Hyperflächen begrenzt wird, berechnet worden [99]. Die d -dimensionalen kompakten Boxen in euklidischen Räumen sind von Coxeter klassifiziert worden [114]. Das Vorgehen ist dabei analog zur Klassifizierung der halbeinfachen Lie-Algebren. Die diskrete Rotationsgruppe (verallgemeinerte kubische Gruppe) wird für diese Boxen durch die Weyl-Gruppe der zugehörigen halbeinfachen Lie-Algebra beschrieben und das (freie) Energiespektrum kann durch die Werte des quadratischen Casimir-Operators (bzw. durch die duale Coxeter Zahl) ausgedrückt werden [99]. Ist man an einer anderen Geometrie der Box als der hyperkubischen und/oder an der Betrachtung in einer anderen Dimension der Raum-Zeit als $3+1$ interessiert, so sollte man mit Hilfe von [99] auch für diese Fälle die periodischen, singulären Lösungen der Helmholtz-Gleichung finden können.

8.3 Streuphasen in der gebrochenen Phase der $O(4)$ - Φ^4 -Theorie

Wie schon mehrfach erwähnt, kann das in Abschnitt 8.2 beschriebene Verfahren nur in massiven Quantenfeldtheorien angewendet werden. Deswegen wird die $O(N)$ -Symmetrie in der Wirkung (3.3) durch eine endliche äußere Quelle $j \neq 0$ explizit gebrochen. Die $N-1$ Goldstone-Bosonen erhalten auf diese Weise eine Masse $m_\pi^2 = jZ/\Sigma$ (in Baumgraphen-Näherung) und werden aus diesem Grund im folgenden mit „Pionen“ bezeichnet.

8.3.1 Kinematische Betrachtungen zur Pion-Streuung

Die 1-Pion-Zustände werden durch ihre Impulse und den „Isospin-Index“ $a = 1, \dots, N-1$ charakterisiert (später wird wieder $N = 4$ gesetzt). Sie transformieren nach der fundamentalen Darstellung $\underline{N-1}$ der $O(N-1)$ -Restsymmetrie in der explizit gebrochenen $O(N)$ -Symmetrie der Φ^4 -Theorie. Das direkte Produkt zweier fundamentaler Darstellungen $\underline{N-1}$ der $O(N-1)$ zerfällt in irreduzible Darstellungen gemäß

$$\underline{N-1} \times \underline{N-1} = \underline{1} + \frac{(N-1)(N-2)}{2} + \frac{(N+1)(N-2)}{2}, \quad (8.26)$$

für $N = 4$: $\underline{3} \times \underline{3} = \underline{1} + \underline{3} + \underline{5},$

³Damit ist eine endliche Überlagerung von ebenen Wellen gemeint.

wobei die unterstrichene Zahl die Dimension der entsprechenden Darstellung anzeigt. In den Anwendungen wird wieder nur die explizit gebrochene $O(4)$ -Symmetrie betrachtet. Die Ausreduktion der Produktdarstellung $\underline{N-1} \times \underline{N-1}$ ist äquivalent zu der Tatsache, daß der Raum der $(N-1) \times (N-1)$ -Matrizen in unter $O(N-1)$ -Transformationen invariante Teilräume zerlegt werden kann: die Einheitsmatrix, antisymmetrische Matrizen und spurlose symmetrische Matrizen. Die Isospin-Projektoren Q^I , die Projektoren auf diese Teilräume, sind durch

$$\begin{aligned} Q_{a'b',ab}^0 &= \frac{1}{N-1} \delta_{a'b'} \delta_{ab}, \\ Q_{a'b',ab}^1 &= \frac{1}{2} (\delta_{a'a} \delta_{b'b} - \delta_{a'b} \delta_{b'a}) \\ Q_{a'b',ab}^2 &= \frac{1}{2} (\delta_{a'a} \delta_{b'b} + \delta_{a'b} \delta_{b'a}) - \frac{1}{N-1} \delta_{a'b'} \delta_{ab}, \end{aligned} \quad (8.27)$$

gegeben. Entsprechend zerfällt die Streuamplitude T , die die elastische 2-Pion-Streuung beschreibt, in Streukanäle zu jeweils festem Isospin 0, 1 und 2:

$$T = \sum_{I=0}^2 Q_I T^I. \quad (8.28)$$

Im Schwerpunktsystem mit Gesamtenergie $W = 2\sqrt{m_\pi^2 + \vec{k}^2}$ ist T^I eine Funktion des Streuwinkels ϑ und des Impulsbetrages $k = |\vec{k}|$ und kann nach Partialwellen t_l^I entwickelt werden:

$$T^I = \frac{16\pi W}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) t_l^I, \quad (8.29)$$

wobei $P_l(\cos \vartheta)$ Legendre-Polynome der Ordnung l bezeichnet [119]. Aufgrund der Bose-Symmetrie verschwinden die Partialwellenamplituden t_l^I für ungerade Werte von $I+l$. Die Unitarität der S -Matrix vorausgesetzt, können die Streuphasen $\delta_l^I(k)$ im elastischen Bereich $2m_\pi < W < 4m_\pi$ durch die folgenden Ausdrücke definiert werden:

$$t_l^I = \frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l^I} - 1) = e^{i\delta_l^I} \sin \delta_l^I = \frac{1}{\cot \delta_l^I - i} = \frac{-1}{\tan(\delta_l^I - \frac{\pi}{2}) + i}. \quad (8.30)$$

8.3.2 Störungstheoretische Ergebnisse zur Pion-Streuung

Die Streuphasen δ_l^I sind bis auf δ_0^0 regulär und können störungstheoretisch berechnet werden (vgl. Berechnung des Goldstone-Boson-Wirkungsquerschnittes in Kap. 7). Setzt man die Instabilität des σ -Teilchens ($m_\sigma > 2m_\pi$) voraus, so liegt der Pol im σ -Propagator auf dem zweiten Blatt bei $-(m_\sigma - i\Gamma_\sigma/2)$. Deswegen ist die Partialwellenamplitude t_0^0 in der Nähe der Resonanzenergie $W = m_\sigma$ maximal und störungstheoretisch erst berechenbar, wenn der singuläre Anteil absepariert wird [105]. Der

singuläre Anteil der Streuphase wird in der Umgebung der Resonanz $W = m_\sigma$ durch die (relativistische) Breit-Wigner-Formel beschrieben⁴ [2]:

$$\tan \left(\delta_0^0 - \frac{\pi}{2} \right) = \frac{W^2 - m_\sigma^2}{m_\sigma \Gamma_\sigma}. \quad (8.31)$$

Störungstheoretische Rechnungen bis zur 1-Schleifen-Ordnung [105] ergeben für die hier untersuchten s -Wellen Streuphasen δ_0^0 und δ_0^2 :

$$\begin{aligned} \delta_0^0 &= \delta_r^0 + \delta_s^0 & (8.32) \\ \text{mit: } \tan \delta_s^0 &= g_R \frac{N-1}{48\pi} \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{m_\sigma^2 - W^2} \frac{k}{W} \\ \text{und: } \delta_r^0 &= \delta_0^2 - g_R \frac{N-1}{48\pi} \frac{k}{W} \\ \delta_0^2 &= \frac{g_R}{96\pi} \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{kW} \ln \left(\frac{4k^2 + m_\sigma^2}{m_\sigma^2} \right) - \frac{g_R}{24\pi} \frac{k}{W}. & (8.33) \end{aligned}$$

Das 2-Teilchen-Energiespektrum im endlichen Volumen kann mit Hilfe der 1-Schleifen-Formeln (8.32) für die Streuphasen durch (graphische oder numerische) Lösung von Gl. (8.20) berechnet werden (s. Abschn. 8.2.2). In dem Beispiel aus Abbildung 8.2 ist die graphische Lösung von Gl. (8.20) im Isospin-0-Kanal für $L=24$, ein realistisches Massenverhältnis $m_\sigma/m_\pi=3$ (mit $m_\pi=0.23$) und eine renormierte Kopplung $g_R=24$ dargestellt.

Die störungstheoretisch berechneten Streuphasen δ_0^0 können zu rein imaginären $k = ik'$ analytisch fortgesetzt werden. Daraus resultieren im Isospin-0-Kanal stationäre Streuzustände, die als Lösungen der Gl. (8.20) für negative q^2 erhalten werden (s. Abbildung 8.2).

Wird die Gitterausdehnung L variiert, so erhält man das in Abbildung 8.3 gezeigte störungstheoretisch „vorhergesagte“ 2-Teilchen-Energiespektrum für o.a. Parameter $g_R=24$, $m_\sigma/m_\pi=3$ und $m_\pi=0.23$. Für den Isospin-0-Kanal veranschaulicht Abbildung 8.3, was man gemeinhin als „Vermeiden der Kreuzung von Niveaulinien“ (*avoided level crossing*) bezeichnet. Die durchgezogenen Linien kommen sich gegenüber den freien Energieniveaus (gepunktete Linien) im Bereich der Resonanzenergie sehr nahe, schneiden sich aber nicht. Das sogenannte Resonanzplateau ist als gepunktete, waagerechte Linie bei $W = 3m_\pi$ eingezeichnet. Im Isospin-2-Kanal (gestrichelte Kurven) werden nur geringe Abweichungen vom freien Energiespektrum erwartet.

Mit Hilfe der störungstheoretischen Ergebnisse (8.32) und (8.33) lassen sich auch die Streulängen ermitteln, die in die asymptotische Entwicklung (8.23) für große

⁴Die nichtrelativistische Breit-Wigner-Formel für die Resonanzstreuung ist:

$$\tan \left(\delta_0^0 - \frac{\pi}{2} \right) = \frac{W - m_\sigma}{\Gamma_\sigma/2}.$$

Diese Gleichung wurde in [125] verwendet.

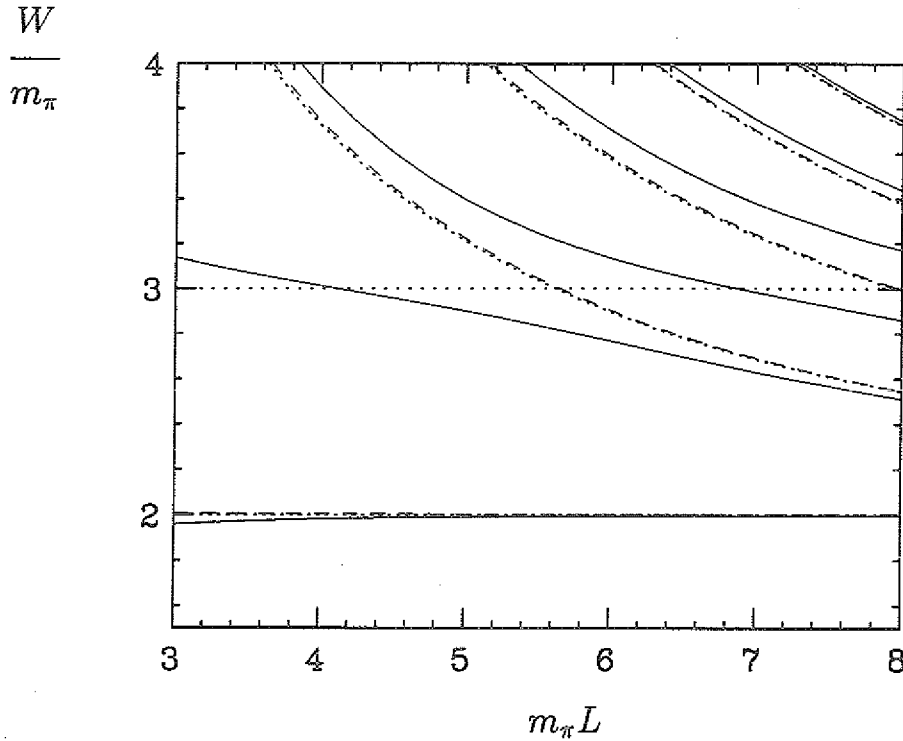


Abbildung 8.3: Das störungstheoretisch vorhergesagte 2-Teilchen-Energie-Spektrum für eine renormierte Kopplung $g_R = 24$ und ein Massenverhältnis $m_\sigma/m_\pi = 3$ (mit $m_\pi = 0.23$): als durchgezogene Linie für den Isospin-0-Kanal und gestrichelt im Isospin-2-Kanal. Gepunktet ist zum Vergleich das freie Energiespektrum (8.3) eingezeichnet. Die Lage der σ -Resonanzenergie m_σ wird durch die Horizontale Linie bei $W = 3m_\pi$ angedeutet.

Volumina eingehen [105]:

$$a_0^0 = \frac{g_R}{96\pi} \frac{m_\pi}{m_\sigma^2} \left\{ \frac{3(N-1)}{1-4(m_\pi^2/m_\sigma^2)} - 2 \right\}, \quad (8.34)$$

$$a_0^2 = -\frac{g_R}{48\pi} \frac{m_\pi}{m_\sigma^2}. \quad (8.35)$$

Der Einfluß der Streuphasen δ_l^0 zu höheren Drehimpulszahlen ($l \geq 4$) ist (störungstheoretisch) vollständig vernachlässigbar. Der Isospin-1-Kanal ist schon von K.M. Bitar und P.M. Vranas [93] – allerdings ohne Verwendung von Lüscher's Schlüsselgleichung (8.20)⁵ – untersucht worden, ohne daß eine ρ -Resonanz gefunden wurde. Deswegen haben wir bisher auf eine Untersuchung dieses Kanals verzichtet. Die Bestätigung der Ergebnisse aus [93] im Rahmen der Lüscher'schen Theorie ist eine der Themenstellungen bei der Fortführung des Projektes.

⁵Lüscher's Verfahren zur Bestimmung der Streuphasen konnten K.M. Bitar und P.M. Vranas nicht anwenden, da sie sich auf masselose Goldstone-Bosonen beschränkt haben (wie auch wir im ersten Teil dieser Arbeit).

	(κ, J)	SCHÄTZWERTE			RESONANZ-LISTE
		m_σ	m_π	m_σ/m_π	L
1	(0.310, 0.005)	0.5383(11)	0.1844(9)	2.88	22, 38
2	(0.315, 0.010)	0.7202(13)	0.2309(8)	3.13	16, 27, 37
3	(0.320, 0.020)	0.9059(16)	0.2977(10)	3.07	13, 22, 30, 35, 38

Tabelle 8.1: Numerisch realisierbare Gitterausdehnungen L , bei denen das 2-Teilchen-Energiespektrum ein Energieniveau im Bereich der Resonanz besitzt.

	(κ, J)	SIMULIERTE GITTERGRÖSSEN $L^3 \cdot T$			
		$16^3 \cdot 32,$	$20^3 \cdot 32,$	$24^3 \cdot 32,$	$32^3 \cdot 40$
1	(0.310, 0.005)				
2	(0.315, 0.010)	$16^3 \cdot 32,$	$20^3 \cdot 32,$	$24^3 \cdot 32,$	$24^3 \cdot 60,$
3	(0.320, 0.020)	$12^3 \cdot 32,$	$16^3 \cdot 32,$	$20^3 \cdot 32,$	$24^3 \cdot 32$

Tabelle 8.2: Tatsächlich realisierte Simulationsparameter (κ, J) und Gittergrößen $L^3 \cdot T$

8.4 Wahl der Simulationsparameter

In Abbildung 5.3 auf Seite 59 sind – mit Hilfe der numerischen Ergebnisse zu den Skalengesetzen aus dem ersten Teil der Arbeit – in der (κ, J) -Ebene Linien konstanter Massenverhältnisse m_σ/m_π eingezeichnet worden (s. auch Diagramm B auf Seite 60). Um sicherzugehen, die σ -Resonanz wirklich im elastischen Bereich $2m_\pi < W < 4m_\pi$ zu beobachten, ist ein Verhältnis $m_\sigma/m_\pi \approx 3$ angestrebt worden (dargestellt durch die durchgezogene Linie in Abb. 5.3). Außerdem müssen für die Anwendbarkeit von Gleichung (8.20) die Volumeneffekte durch Vakuumpolarisationen der Pionen unterdrückt sein. Oberhalb der gepunkteten Linie in Abbildung 5.3 ist dies für $L \geq 16$ zu erwarten. Aus diesen Überlegungen ist die Wahl der drei in Abbildung 5.3 durch fette Punkte markierten Simulationspunkte $(\kappa, J) = (0.310, 0.005)$, $(0.315, 0.010)$ und $(0.320, 0.020)$ zustande gekommen.

Definieren wir k_σ durch die Resonanzenergie $W = m_\sigma$, bei der die Streuphase den Wert $\delta_0^0 = \pi/2$ annimmt:

$$k_\sigma = 2\sqrt{\frac{m_\sigma^2}{4} - m_\pi^2}, \quad (8.36)$$

so ist bei der Resonanzenergie die (Gitter)-Ausdehnung

$$L = \frac{2\pi q(0)}{k_\sigma}, \quad (8.37)$$

wobei für $q_{(0)}$ die Funktion $\phi(q)$ gemäß der Bedingung (8.20) bei der Resonanz ebenfalls $\pi/2 \pmod{\pi}$ sein muß. *Per definitionem* sind dies gerade die Nullstellen $q_{(0)}$ der Zeta-Funktion $\mathcal{Z}_{00}(1; q^2)$, die in Tabelle E.2 aufgelistet sind.

Aus Testläufen oder mit Hilfe der Ergebnisse zu den Skalengesetzen aus dem ersten Teil lassen sich m_π , m_σ und damit k_σ bestimmen. Dabei wird vorausgesetzt, daß die Resonanzmasse m_σ ungefähr mit der Masse $\bar{m}_\sigma$ aus dem Fit an den Propagator im Impulraum übereinstimmt. Die Ergebnisse aus Kapitel 10 zeigen schließlich, daß diese Annahme nur näherungsweise gilt. Mit den Nullstellen der Zeta-Funktion aus Tabelle E.2 läßt sich (in Tabelle 8.1) die Liste realisierbarer Gitterausdehnungen L angeben, für die ein Energieeigenwert in der Umgebung der Resonanz angenommen wird.

Die zeitliche Ausdehnung T des Gitters sei immer größer als die räumliche Ausdehnung L . Motiviert, in den Simulationen wirklich den Resonanzbereich zu treffen, sind die in Abbildung 5.3 markierten Simulationspunkte (κ, J) und die in Tabelle 8.2 aufgeführten Gittergrößen $L^3 \cdot T$ gewählt worden.

Inwiefern diese Wahl der Simulationsparameter (κ, J) und der Gittergrößen L erfolgreich für die „Entdeckung“ der σ -Resonanz gewesen ist, werden die nächsten Kapitel verdeutlichen.

Kapitel 9

Energiespektren im endlichen Volumen

Die Simulationsparameter in der Gitter-Wirkung $S\{\bar{\Phi}; J, \kappa\}$ (3.3) sind so gewählt worden, daß die σ -Resonanzmasse im Bereich der elastischen Streuung liegt (s. Tabelle 8.2 und Abbildung 5.3). Zunächst wird das 1-Teilchen-Energiespektrum gemessen, um festzustellen, inwieweit die exponentiell abfallenden Volumenabhängigkeiten aufgrund von Vakuumpolarisationen unterdrückt sind, und ob die Effekte der endlichen Gitterkonstante kontrolliert werden können. Aus der Extrapolation der 1-Teilchen-Energien bei räumlichem Impuls $\vec{p} = 0$ ins unendliche Volumen wird die Masse m_π der Pionen bestimmt.

Nach der Definition geeigneter 2-Teilchen-Operatoren wird ausführlich das Verfahren zur Bestimmung der 2-Teilchen-Energieniveaus beschrieben. Nach dem Motto „*variatio delectat*“ werden anhand von Bildern und Tabellen unterschiedliche Berechnungsverfahren für das 2-Teilchen-Energiespektrum diskutiert, die im wesentlichen zu konsistenten Ergebnissen führen. Damit sollen eventuelle systematische Fehlerquellen ausgeschlossen und die Qualität der Analyse gesteigert werden.

9.1 Berechnung der Pion-Masse und des 1-Teilchen-Energiespektrums

Wird die Teilchenmasse m_π als 1-Teilchen-Energie bei räumlichen Impuls $\vec{p} = 0$ im unendlichen Volumen definiert, so wird erwartet, daß die relativistische Energie-Impuls-Bilanz

$$E(\vec{p}) = \sqrt{m_\pi^2 + \vec{p}^2} \quad (9.1)$$

auch auf dem endlichen Gitter gültig bleibt, sofern $m_\pi L \gg 1$ und $|\vec{p}| \ll 1$ gelten. Die erste Ungleichung sichert die schon mehrfach erwähnte exponentielle Unterdrückung der Volumeneffekte der 1-Teilchen-Energiewerte [101]. Aufgrund der allgemeinen Überlegungen aus Abschnitt 3.3 sollten die mit der zweiten Ungleichung in Verbindung stehenden Gittereffekte für die Standard-Wirkung mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung proportional zum Quadrat des Gitterabstandes abnehmen.

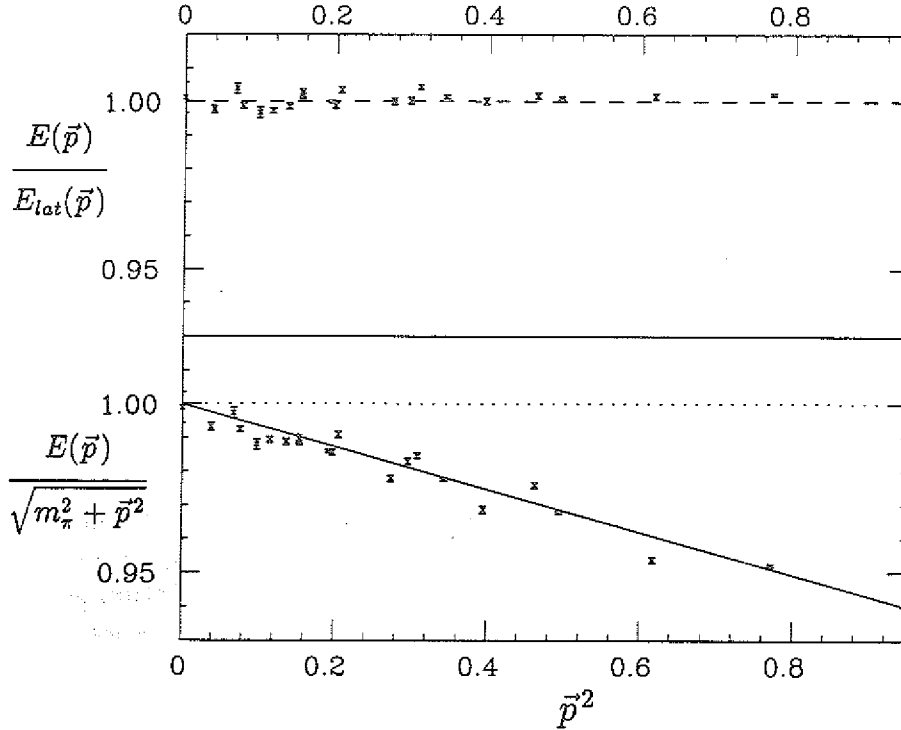


Abbildung 9.1: Das gemessene 1-Teilchen-Energie-Spektrum $E(\vec{p})$ im Vergleich zur Gitter bzw. zur Kontinuums-Dispersionsrelation als Funktion von $|\vec{p}|^2$ für den Simulationspunkt ($\kappa = 0.315$, $J = 0.01$).

In der Regel machen sich diese Korrekturen in der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (9.1) quantitativ stärker bemerkbar.

Um den Einfluß von Gittereffekten bewerten zu können, sind zunächst die 1-Teilchen-Energieniveaus gemessen worden. Dazu wurde der exponentielle Abfall des Propagators

$$\left\langle \sum_{a=1}^3 \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}_L^3} \delta_{j,\vec{n}^2} \tilde{\Phi}^a(-\vec{n}, t) \tilde{\Phi}^a(\vec{n}, 0) \right\rangle \sim e^{-E(\vec{p})t} \quad (9.2)$$

mit $\vec{p}^2 = (2\pi/L)^2 \vec{n}^2 = (2\pi/L)^2 j$ untersucht. Für die Berechnung dieses Operators muß die räumliche Fourier-Transformation $\tilde{\Phi}(\vec{n}, t)$ des reellen Pion-Feldes $\Phi^a(\vec{x}, t)$ bestimmt werden. Für eine allgemeine Gitterfunktion $F(\vec{x})$ lautet die räumliche Fourier-Transformation auf dem Gitter (vgl. Diagramm D auf Seite 186):

$$\tilde{F}(\vec{n}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{x} \in \mathbb{Z}_L^3} e^{i2\pi \vec{x} \cdot \vec{n}/L} F(\vec{x}). \quad (9.3)$$

Abbildung 9.1 zeigt, daß die numerischen Daten des 1-Teilchen-Energiespektrums sehr gut durch einen Fit mit dem Ansatz:

$$E(\vec{p}) \approx \sqrt{m_\pi^2 + \vec{p}^2} (1 + c_p \vec{p}^2) \quad (9.4)$$

j	$\vec{n}$	$ \vec{p} /m_\pi$	$E(\vec{p})/\sqrt{m_\pi^2 + \vec{p}^2}$	$E(\vec{p})/E_{lat}(\vec{p})$
1	(1, 0, 0)	0.8539	0.9932(12)	0.9976(12)
2	(1, 1, 0)	1.2076	0.9924(8)	0.9987(8)
3	(1, 1, 1)	1.4790	0.9893(8)	0.9973(8)
4	(2, 0, 0)	1.7078	0.9885(6)	1.0016(6)
5	(2, 1, 0)	1.9093	0.9859(4)	1.0000(4)

Tabelle 9.1: Das gemessene 1-Teilchen-Energie-Spektrum $E(\vec{p})$ im Vergleich zur relativistischen Kontinuums- bzw. zur Gitter-Dispersionsrelation (9.5) als Funktion von $|\vec{p}|$ für den Simulationspunkt ($\kappa = 0.315$, $J = 0.01$, $L = 32$). In der zweiten Spalte sind entsprechende Repräsentanten der Gitterimpulse $\vec{n}$ mit $\vec{n}^2 = j$ aufgelistet, für die das Spektrum berechnet wurde. Sie werden für die Berechnung von $\vec{p}$ in Gl. (9.5) benötigt.

angenähert werden. Die dabei bestimmten Werte der Konstante c_p sind für die einzelnen Simulationspunkte in Tabelle 9.2 zu finden. Alternativ werden die Daten auch mit der Gitter-Dispersionsrelation

$$E(\vec{p}) \approx E_{lat}(\vec{p}) = 2 a \sinh \left(\frac{1}{2} \sqrt{m_\pi^2 + \vec{p}^2} \right), \quad \hat{p}_i = 2 \sin \frac{p_i}{2}. \quad (9.5)$$

verglichen. Bei beiden Methoden wird eine zuverlässige Übereinstimmung mit den Daten festgestellt (s. Abbildung 9.1 und Tabelle 9.1).

Gleichzeitig kann aus der Extrapolation der 1-Teilchen-Energien mit räumlichem Impuls $\vec{p} = 0$ ins unendliche Volumen die Masse m_π der Pionen bestimmt werden. Die Methode läßt sich noch dahingehend verfeinern, daß zunächst Fits der Art (9.4) und (9.5) für feste Gitterausdehnung L durchgeführt werden, und anschließend die L -abhängigen Größen $m_\pi(L)$ (und $c_p(L)$) ins unendliche Volumen extrapoliert werden. Dadurch werden alle Energiewerte des 1-Teilchen-Energiespektrums zur Berechnung der Pion-Masse herangezogen.

Die führenden Volumenkorrekturen sollten nach der Diskussion in Kapitel 5 proportional zu $-\bar{g}_1(m_\pi L)/(m_\pi L)^2$ sein. Unter der Voraussetzung, daß diese Polarisierungseffekte exponentiell mit einem Faktor $\exp(-m_\pi L)$ unterdrückt sind, erhalten wir für das niedrigste Energieniveau mit $\vec{p} = 0$ die Masse m_π der Pionen im unendlichen Volumen (s. Tabelle 9.2).

Alternativ läßt sich die Pion-Masse m_π aus einem Fit an den Propagator im Impulsraum mit Hilfe des Ansatzes (5.98) messen – damit ist die 4dimensionale Fouriertransformation gemeint. Die ausgezeichnete Qualität dieses Fits veranschaulicht Abbildung 9.2. Innerhalb von 1% Abweichung erhält man nach der Extrapolation ins unendliche Volumen das gleiche Resultat wie mit der Bestimmung aus dem 1-Teilchen-Energiespektrum.

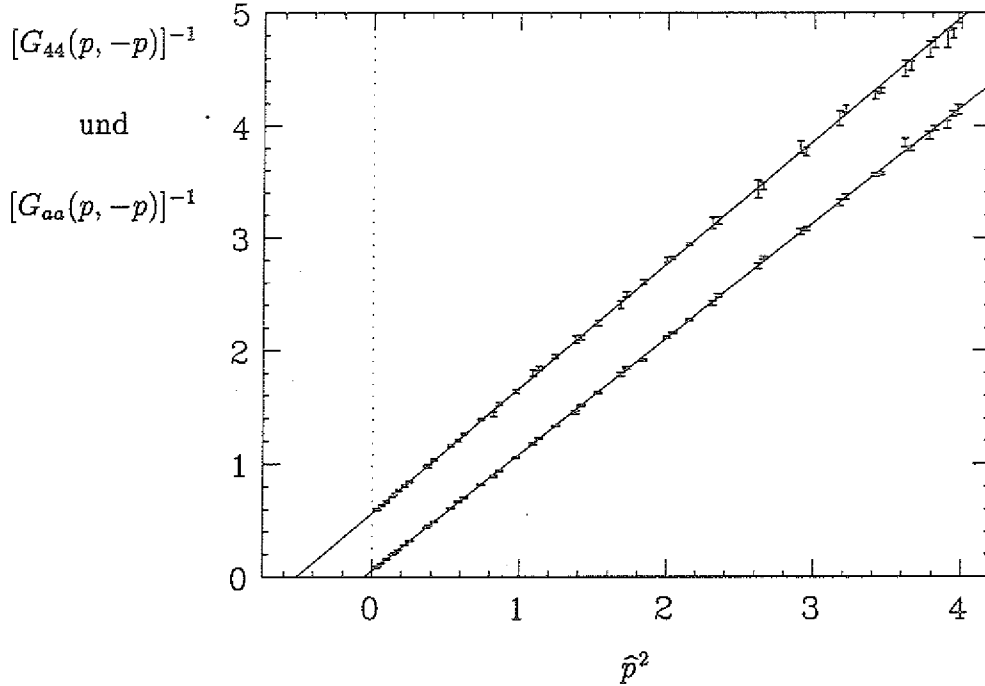


Abbildung 9.2: Dargestellt sind 2-Parameter-Fits an den inversen σ -Propagator (obere Kurve) bzw. den inversen Pion-Propagator (untere Kurve) im Impulsraum für das $32^3 \cdot 40$ -Gitter bei $(\kappa = 0.315, J = 0.01)$. Die Schnittpunkte mit der Abszissenachse liefern die entsprechenden Werte für die negativen Massenquadrate.

Der Felderwartungswert Σ im unendlichen Volumen wird – wie in Abschnitt 5.4.2 diskutiert – aus der Volumenabhängigkeit des Erwartungswertes der Magnetisierung in Richtung der äußeren Quelle (s. Gl. (5.101)) bestimmt. In die störungstheoretischen Rechnungen wird die Definition

$$g_R = 3 Z \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{\Sigma^2} \quad (9.6)$$

der renormierten Kopplung auf dem Baumgraphen-Niveau eingesetzt. Zur Auswertung des Ausdruckes (9.6) ist die Angabe der σ -Masse erforderlich. Auch wenn die σ -Masse später aus der Resonanzenergie der Streuphase δ_0^0 bestimmt werden soll, so ist doch eine erste „Schätzung“ $\tilde{m}_\sigma$ der σ -Masse durch einen Fit an den σ -Propagator im Impulsraum legitim (s. Abschnitt 5.4.3 und Abbildung 9.2). Die Volumenabhängigkeiten der σ -Masse sind exponentiell unterdrückt und werden erwartungsgemäß nicht festgestellt.

Die Ergebnisse für die Pion-Masse m_π , den Felderwartungswert Σ , die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z sowie die „Schätzwerte“ $\tilde{m}_\sigma$ und $\tilde{g}_R$ für die σ -Masse bzw. die renormierte Kopplung faßt Tabelle 9.2 zusammen.

	SIMULATIONSUNKTE		
	1	2	3
κ	0.310	0.315	0.320
J	0.005	0.010	0.020
m_π	0.1870(6)	0.2300(6)	0.2947(6)
$\tilde{m}_\sigma$	0.5383(11)	0.7202(13)	0.9059(16)
Σ	0.18455(3)	0.23574(2)	0.28096(2)
Z	0.9745(5)	0.9723(5)	0.9715(5)
Z_σ	0.9323(10)	0.9130(12)	0.8966(13)
$\tilde{g}_R$	21.96(13)	24.43(12)	27.03(14)
c_p	-0.0614(4)	-0.0634(4)	-0.0602(2)

Tabelle 9.2: Die Stammdaten für m_π , Σ , Z , $\tilde{g}_R$, $\tilde{m}_\sigma$ für die einzelnen Simulationspunkte (κ , J), mit deren Hilfe die Streuphasen störungstheoretisch berechnet werden können.

9.2 Wie wird das 2-Teilchen-Energiespektrum gemessen?

Zunächst müssen 2-Teilchen-Operatoren definiert werden, die auf 2-Pion-Zustände mit den gewünschten Quantenzahlen projizieren. Die 2-Pion-Zustände in dem hier untersuchten Modell werden bezüglich der verbliebenen $O(3)$ -Symmetrie in die Isospin-Kanäle 0, 1 und 2 klassifiziert (s. Gl. (8.27)) und sind Eigenzustände zur kubischen Gruppe $O(3, \mathbb{Z})$, einer Untergruppe der Drehgruppe $O(3, \mathbb{R})$. Auch wenn es sich *a priori* nicht um Energieeigenzustände handelt, sollen die 2-Teilchen-Operatoren doch ein vollständiges System von 2-Pion-Zuständen unterhalb der inelastischen Schwelle und innerhalb des entsprechenden Isospin-Kanals bilden.

Des weiteren werden Korrelationsfunktionsmatrizen dieses im Bereich der elastischen 2-Teilchen-Streuung vollständigen Satzes von 2-Teilchen-Operatoren definiert, deren spektrale Zerlegung eine Bestimmung des 2-Teilchen-Energiespektrums ermöglicht. In den folgenden Abschnitten werden die Details zur Messung der Korrelationsfunktionsmatrix und zur Berechnung der 2-Teilchen-Energieniveaus beschrieben. Speziell wird auch die Möglichkeit der 2-Cluster-Methode [107] zur Berechnung der Korrelationsfunktionsmatrizen diskutiert.

9.2.1 2-Teilchen-Operatoren

Die Zwei-Teilchen-Operatoren für zwei Pionen mit Gesamtimpuls Null werden in der Ortsraum-Darstellung auf dem Gitter als folgende Doppelsumme über den räumlichen Anteil der Pionfelder definiert [107]

$$\mathcal{O}_i^{ab}(t) := \frac{1}{L^6} \sum_{\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{Z}_L^3} f_i(\vec{x} - \vec{y}) \Phi^a(\vec{x}, t) \Phi^b(\vec{y}, t). \quad (9.7)$$

Die Funktionen $f_i(\vec{x} - \vec{y})$ ($i = 1, 2, \dots$) gehören zu einer Basis von Wellenfunktionen, die im Kontinuumslimit den Lösungen der zugehörigen Schrödingergleichung zu Energieeigenwerten im Bereich der elastischen 2-Teilchen-Streuung entsprechen sollen (mehr dazu in Abschnitt 9.2.2).

Da die numerische Auswertung der Doppelsumme für drei Raumdimensionen sehr rechenzeitaufwendig ist, wird der Zwei-Teilchen-Operator in die Impulsgitter-Darstellung transformiert:

$$\mathcal{O}_i^{ab}(t) = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}_L^3} \tilde{f}_i(\vec{n}) \tilde{\Phi}^a(-\vec{n}, t) \tilde{\Phi}^b(\vec{n}, t). \quad (9.8)$$

Die Funktionen $\tilde{f}_i(\vec{n})$, ($i = 1, 2, \dots$), bilden, wie die Funktionen $f_i(\vec{x})$ im Ortsraum, eine Basis von Wellenfunktionen auf dem Impulsgitter. $\tilde{\Phi}^a(\vec{n}, t)$ ist die schon im vorhergehenden Abschnitt eingeführte räumliche Fourier-Transformierte des Gitterfeldes $\Phi^a(\vec{x}, t)$:

$$\tilde{\Phi}^a(\vec{n}, t) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{x}} \Phi^a(\vec{x}, t) e^{i2\pi \vec{x} \cdot \vec{n} / L}. \quad (9.9)$$

Da die skalaren Felder $\Phi^a(\vec{x}, t)$ reell sind, gilt $\overline{\tilde{\Phi}^a(\vec{n}, t)} = \tilde{\Phi}^a(-\vec{n}, t)$. Folglich gilt für im Impulsraum reelle Wellenfunktionen¹: $\overline{\mathcal{O}_i^{ab}(t)} = \mathcal{O}_i^{ba}(t)$. Überstreichung einer Größe bedeutet in diesem Zusammenhang komplexe Konjugation.

9.2.2 Auswahl der 2-Teilchen-Wellenfunktion

Die 2-Teilchen-Wellenfunktionen f_i sollen idealerweise Lösungen der Schrödingergleichung für das quantenmechanische Streuproblem zu Energieeigenwerten im Bereich der elastischen 2-Teilchen-Streuung sein, damit die 2-Teilchen-Operatoren (9.8) bestmöglich auf die entsprechenden Energieeigenzustände projizieren. In den beiden Isospin-Kanälen 0 und 2, die bisher untersucht worden sind, werden zwei unterschiedliche Arten kubisch invarianter Wellenfunktionen verglichen.

Zunächst werden – wie dies auch schon in den 2dimensionalen Modellen geschehen ist [107, 97] – ebene Wellen genommen:

$$\tilde{f}_i(\vec{n}) = \frac{\delta_{j, \vec{n}^2}}{\sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}_L^3} \delta_{j, \vec{n}^2}}, \quad \text{mit } i = I(j). \quad (9.10)$$

¹In der Ortsdarstellung bedeutet dies $\overline{f_i(\vec{x})} = f_i(-\vec{x})$. – Für rein imaginäre Wellenfunktionen $\tilde{f}_i(\vec{n})$ würde $\overline{\tilde{f}_i(\vec{x})} = -f_i(-\vec{x})$ und $\overline{\mathcal{O}_i^{ab}(t)} = -\mathcal{O}_i^{ba}(t)$ gelten.

Der Index $i = 0, 1, 2, \dots$ numeriert die ganzen Zahlen j durch, für die ein dreidimensionaler Vektor $\vec{n}$ des Längenquadrates $\vec{n}^2 = j$ existiert² (s. Anhang E).

Motiviert durch die periodischen, singulären Lösungen (8.13) der Helmholtz-Gleichung [103] sind alternativ folgende Wellenfunktionen benutzt worden:

$$\tilde{f}_i(\vec{n}) = \frac{(\vec{n}^2 - q_i^2)^{-1}}{\sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}_L^3} (\vec{n}^2 - q_i^2)^{-1}}, \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (9.11)$$

Die darin benötigten Werte von $q_i = (L/2\pi)\sqrt{(W_i/2)^2 - m_\pi^2}$ werden aus einigen Testläufen, in denen man das Energiespektrum W_i mit ebenen Wellen bestimmt hat, gewonnen. Eine alternative Möglichkeit, Werte für q_i vorzugeben, bieten die mit den Angaben aus Tabelle 9.2 störungstheoretisch berechneten Streuphasen (8.32) und (8.33): durch Auflösung der Gleichung (8.20) nach k_i lassen sich die Werte $q_i = k_i L/2\pi$ berechnen.

Die letztgenannten Funktionen sollen in stärkerem Maße als die ebenen Wellen auf die Energiezustände in der Nähe der Resonanz projizieren, da sie speziell die kubischen Randbedingungen bei Anwesenheit eines kurzreichweitigen Streupotentials berücksichtigen (vgl. Herleitung der Quantisierungsbedingung (8.20) in Abschnitt 8.2.2).

Will man Wellenfunktionen der Art (9.10) oder (9.11) auch für den Isospin-1-Kanal benutzen, so muß man nicht die kubisch invarianten Funktionen aus dem A_1^+ Sektor, sondern vektorartige Funktionen $\sim \vec{n} \delta_{j, \vec{n}^2}$ bzw. $\sim \vec{n}/(\vec{n}^2 - q_i^2)$ aus dem T_1^- Sektor verwenden (s. Abschn. 8.2.2). Da sich bei der Analyse der Daten für die Isospins 0 und 2 jedoch keine Abhängigkeit von der verwendeten Wellenfunktion feststellen ließ, wird vermutet, daß für Isospin 1 ein Ansatz mit ebenen Wellen ebenfalls zufriedenstellende Ergebnisse liefern wird.

9.2.3 Korrelationsfunktionsmatrix

Für jeden Isospin-Kanal wird die (zusammenhängende) Korrelationsfunktionsmatrix der Operatoren $\mathcal{O}_i^{ab}(t)$ untersucht:

$$\begin{aligned} C_{ij}^I(t) &:= Q_{a'b', ab}^I \left\langle \overline{\mathcal{O}_i^{a'b'}(t)} \mathcal{O}_j^{ab}(0) \right\rangle_c \\ &= Q_{a'b', ab}^I \left(\left\langle \overline{\mathcal{O}_i^{a'b'}(t)} \mathcal{O}_j^{ab}(0) \right\rangle - \left\langle \overline{\mathcal{O}_i^{a'b'}(t)} \right\rangle \left\langle \mathcal{O}_j^{ab}(0) \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (9.12)$$

Da die σ -Resonanz im Isospin-0-Kanal erwartet wird, beschränken wir uns zunächst auf diesen Fall. Die zugehörigen reellen 2-Pion-Operatoren $O_i(t)$ auf dem Gitter sind durch die Spur der Operatoren (9.8) im Raum der inneren $O(3)$ -Symmetrie gegeben (s. Gl. (8.27)):

$$O_i(t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{a=1}^3 \mathcal{O}_i^{aa}(t). \quad (9.13)$$

²Der Unterschied zwischen j und $I(j)$ wird erst ab $j=7$ bemerkbar.

Da das σ -Feld mit räumlichem Impuls Null die gleichen Quantenzahlen trägt wie die 2-Pion-Operatoren (9.13), muß es im Isospin-0-Kanal mitberücksichtigt werden:

$$O_\sigma(t) = \tilde{\Phi}^4(\vec{0}, t) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{x} \in \mathbb{Z}_L^3} \Phi^4(\vec{x}, t). \quad (9.14)$$

Das Vorgehen zeigt eine gewisse Analogie zur störungstheoretischen Rechnung aus Abschnitt 8.3, in der die Instabilität des σ -Teilchens aufgrund von kinematischen Überlegungen ($m_\sigma > 2m_\pi$) – gewissermaßen auch per Hand – eingeführt wird, um die Singularität der Partialwellenamplitude t_0^0 bei der Resonanzenergie m_σ zu kontrollieren und somit die Unitarität sicherzustellen. Die Hinzunahme des Operators $O_\sigma(t)$ hat sich als essentiell für die weitere Analyse herausgestellt. Ähnliche Erfahrungen haben auch C.R. Gattlinger und C.B. Lang [97] in ihrem 2dimensionalen Resonanzmodell gemacht.

Durch Auswertung der Definition der Korrelationsfunktionsmatrix (9.12) für die unterschiedlichen Isospin-Kanäle ergeben sich mit Hilfe von Gl. (8.27) folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} C_{ij}^0(t) &= \langle O_i(t) O_j(0) \rangle_c & i = \sigma, 0, 1, 2, \dots, \\ C_{ij}^1(t) &= \langle \text{Im } O_i^{ab}(t) \text{Im } O_j^{ab}(0) \rangle_c & i = 1, 2, \dots, \\ C_{ij}^2(t) &= \langle \text{Re } O_i^{ab}(t) \text{Re } O_j^{ab}(0) \rangle_c - C_{ij}^0(t) & i = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (9.15)$$

wobei Summationen über gleiche Indizes a, b auszuführen sind.

In den numerischen Simulationen wird ein bequemerer Zugang zu den zusammenhängenden Korrelationsfunktionsmatrizen gewählt als derjenige, der durch die Definition (9.12) vorgegeben ist [107]. Die programmierten Ausdrücke sind von der Art³

$$C_{ij}(t) = \langle (O_i(t) - O_i(t+1)) O_j(0) \rangle \quad (9.16)$$

und nutzen die Translationsinvarianz sowie die periodischen Randbedingungen in der Zeitrichtung aus. Der Transfermatrixformalismus führt zu folgender Spektralzerlegung dieser Korrelationsfunktionsmatrizen [100]

$$C_{ij}(t) = \sum_{\nu} \bar{v}_i^{\nu} v_j^{\nu} e^{-tW_{\nu}} \quad \text{mit} \quad v_j^{\nu} = \sqrt{1 - e^{-W_{\nu}}} \langle \nu | O_j(0) | 0 \rangle. \quad (9.17)$$

Das Energiespektrum sei nicht entartet⁴ und o.B.d.A. nach aufsteigenden Werten W_{ν} geordnet. Die Amplituden v_j^{ν} in der Spektralzerlegung (9.17) sind die Projektionen der Zustände, die durch den 2-Teilchen-Operator aus dem Vakuum erzeugt werden, auf die Energieeigenzustände $\langle \nu |$ zu W_{ν} . Die merkwürdig erscheinende Normierung ist eine Folge der Definition (9.16).

³Isospin-Indizes werden in dieser und den folgenden Beziehungen weggelassen.

⁴Zumindest ist das gemäß Gl. (8.20) nicht anders zu erwarten.

Unterhalb der inelastischen Schwelle gibt es nur eine endliche Anzahl $\bar{\nu}$ von Energieeigenzuständen

$$\bar{\nu} = \max_{\nu} \{ \nu \mid W_{\nu} \leq 4m_{\pi} \}. \quad (9.18)$$

Natürlich kann man in einer numerischen Untersuchung aufgrund begrenzter Computerressourcen sowieso nur eine endliche Anzahl $\bar{r}$ von 2-Teilchen-Operatoren berücksichtigen⁵. Die auf den Rang $\bar{r}$ gestutzte Korrelationsfunktionsmatrix $\bar{C}(t)$ mit der Spektralzerlegung

$$\bar{C}_{ij}(t) = \sum_{\nu} \bar{v}_i^{\nu} \bar{v}_j^{\nu} e^{-tW_{\nu}} \quad (9.19)$$

ist ein guter Schätzwert für die Matrix $C(t)$, da die Reihenentwicklung (zumindest) für Energiezustände unterhalb der inelastischen Schwelle konvergiert. Es sollte jedoch stets $\bar{r} > \bar{\nu}$ sichergestellt sein, um mindestens auf $\bar{\nu}$ linear unabhängige $\bar{r}$ -komponentige Vektoren $\mathbf{v}^{\nu}$ im Bereich der elastischen 2-Teilchen-Streuung zurückgreifen zu können.

Die Eigenwerte der Korrelationsfunktionsmatrix $\bar{C}(t)$ sind für große Zeiten t proportional zu $e^{-tW_{\nu}}$. Jedoch unterliegen die numerischen Messungen der Matrix $\bar{C}(t)$ für große Zeiten t in der Regel größeren statistischen Schwankungen als bei kleinen Zeiten. Das verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$\bar{C}(t) \mathbf{w}^{\nu} = \lambda_{\nu}(t, t_0) \bar{C}(t_0) \mathbf{w}^{\nu} \quad (9.20)$$

hingegen ermöglicht – bei Vorgabe eines (kleinen) Referenzzeitpunktes t_0 – auch für nicht allzu große Zeiten $t > t_0$ eine zuverlässigere Bestimmung der Energie-Eigenwerte W_{ν} [107]. Die Eigenwerte $\lambda_{\nu}(t, t_0)$ des verallgemeinerten Eigenwertproblems lauten⁶

$$\lambda_{\nu}(t, t_0) = e^{-(t-t_0)W_{\nu}}. \quad (9.21)$$

Die zugehörigen Eigenvektoren $\mathbf{w}^{\nu}$ sind proportional zu $\mathbf{v}^{\nu}$ und somit ebenfalls zeitunabhängig (s. Gl. (9.17)). Das Betragsquadrat der i -ten Komponente $|v_i^{\nu}|^2/|\mathbf{v}^{\nu}|^2$ des normierten Eigenvektors $\mathbf{v}^{\nu}/|\mathbf{v}^{\nu}|$ gibt das relative Gewicht an, mit dem der 2-Teilchen-Operator $\mathcal{O}_i$ zum Energieeigenzustand $|\nu\rangle$ beiträgt [97].

Zur Auswertung wird das verallgemeinerte Eigenwertproblem (9.20) in ein äquivalentes Standard-Eigenwertproblem für die Matrix

$$\mathcal{D}(t, t_0) = \bar{C}^{-\frac{1}{2}}(t_0) \bar{C}(t) \bar{C}^{-\frac{1}{2}}(t_0) \quad (9.22)$$

mit denselben Eigenwerten $\lambda_{\nu}(t, t_0)$ und mit Eigenvektoren $\mathbf{u}^{\nu} = \bar{C}^{\frac{1}{2}}(t_0) \mathbf{v}^{\nu}$ überführt. Die Verfahren zur Diagonalisierung der Matrizen $\mathcal{D}(t, t_0)$, zur Bestimmung der Energieeigenwerte W_{ν} sowie die dazugehörigen Fehlerabschätzungen werden in Abschnitt 9.4 diskutiert. Zunächst einige Bemerkungen zu einer alternativen Messung der Korrelationsfunktionsmatrizen über die 2-Cluster-Methode [107].

⁵ Abgesehen davon gibt es eine absolute obere Schranke an die Anzahl $\bar{r}$ der unabhängigen 2-Teilchen-Operatoren, die sich aus der Endlichkeit des Impulsgitters in den Definitionen (9.10) und (9.11) ergibt.

⁶ Die notwendigen Umformungen, die den Vorteil (die Unterdrückung der Beimischung anderer Energieeigenwerte auch für kleine Zeiten) erkennen lassen, können in wenigen Schritten nachvollzogen werden [107, 97].

2-Cluster-Methode

Für die Isospin-Kanäle $I=1, 2$ können 2-Teilchen-Operatoren mit reduzierter Varianz (*improved estimators*) definiert werden [107]:

$$\mathcal{O}_i^{(\vec{r}, \vec{s})}(t) = \frac{|\Lambda|}{\sqrt{|\mathbf{C}_{\vec{r}}| |\mathbf{C}_{\vec{s}}|}} \sum_{\vec{x} \in \mathbf{C}_{\vec{r}}, \vec{y} \in \mathbf{C}_{\vec{s}}} f_i(\vec{x} - \vec{y}) r^a \Phi^a(\vec{x}, t) s^b \Phi^b(\vec{y}, t). \quad (9.23)$$

Für ihre Messung werden aufeinanderfolgend zwei Einzel-Cluster $\mathbf{C}_{\vec{r}}$ und $\mathbf{C}_{\vec{s}}$ bezüglich zweier unabhängiger, zum äußeren Strom J orthogonaler $O(3)$ -Richtungen $\vec{r}$ und $\vec{s}$ erzeugt. Dieses Verfahren wird in Abschnitt 4.2 und in Anhang A beschrieben. Die mit dieser sogenannten 2-Cluster-Methode erzeugten Cluster können allerdings nicht zum Aufdatieren der Feld-Konfiguration verwendet werden, da die Felder in Richtung der äußeren Quelle J davon unberührt bleiben. Die zugehörigen Korrelationsfunktionsmatrizen nehmen folgende Gestalt an ($N=4$):

$$C_{ij}^1(t) = (N-1)(N-2) \left\langle \text{Im } \mathcal{O}_i^{(\vec{r}, \vec{s})}(t) \text{Im } \mathcal{O}_j^{(\vec{r}, \vec{s})}(0) \right\rangle, \quad (9.24)$$

$$C_{ij}^2(t) = (N(N-1)-2) \left\langle \text{Re } \mathcal{O}_i^{(\vec{r}, \vec{s})}(t) \text{Re } \mathcal{O}_j^{(\vec{r}, \vec{s})}(0) \right\rangle. \quad (9.25)$$

Der Rechenaufwand zur Berechnung der Doppelsumme in Gl. (9.23) erweist sich allerdings nur für die ebenen Wellen (9.10) als vertretbar. Im interessanten Isospin-0-Kanal wird allenthalben keine Verbesserung erwartet [107].

9.3 Details zu den numerischen Simulationen

Zur Erzeugung der Konfigurationen wird der in Kap. 4 vorgestellte Clusteralgorithmus verwendet, der wie in Anhang A beschrieben auf den Fall mit endlichem äußeren Strom J verallgemeinert werden kann [61]. Die Korrelationsfunktionen der 2-Teilchen-Operatoren mit den ebenen Wellen wurden ebenfalls in der 2-Cluster-Darstellung (9.25) gemessen und mit den Ergebnissen aus der direkten Messung (9.15) verglichen. Im Isospin-0-Kanal wurde – wie erwartet – keine Reduzierung der Varianz der gemessenen Operatoren (9.15) festgestellt. Aus diesem Grund, und weil die Rechnungen für andere 2-Teilchen-Funktionen als die ebenen Wellen zu zeitintensiv sind, ist ihre Messung nach einigen Testläufen wieder eingestellt worden.

Die Simulationen werden auf den zylindrischen Gittern $L^3 \cdot T$ durchgeführt, die in Tabelle 8.2 angegeben sind. Wegen des geringeren Hauptspeichers der HLRZ-CRAY Y-MP8/832 kann dort nur auf den $12^3 \cdot 32$ -, $16^3 \cdot 32$ - und $20^3 \cdot 32$ -Gittern gerechnet werden (s. Tabelle 9.3). Die Produktionsläufe für die größeren Gitter $24^3 \cdot 32$, $24^3 \cdot 60$ und $32^3 \cdot 40$ werden auf dem Landesvektorrechner Fujitsu/Siemens-Nixdorf SNI S600/20 in Aachen durchgeführt. Der Versuch, auch auf einem $40^3 \cdot 56$ -Gitter ausreichend Statistik zu bekommen, ist vorerst abgebrochen worden.

Der überwiegende Teil der Rechnungen ist in niedrigster Priorität gerechnet worden. In dieser Klasse kostet eine Stunde Rechenzeit auf der CRAY ca. 260 Kosteneinheiten (260 DM) und auf dem Landesvektorrechner ca. 360 000 Kosteneinheiten

Gitter- größe	Speicher- bedarf	Anzahl Iterationen [Blöcke]		
		($\kappa=0.310$) ($J=0.005$)	($\kappa=0.315$) ($J=0.010$)	($\kappa=0.320$) ($J=0.020$)
$12^3 \cdot 32$	25MB	—	—	327 680 [80]
$16^3 \cdot 32$	40MB	147 456 [36]	147 456 [36]	147 456 [36]
$20^3 \cdot 32$	70MB	147 456 [36]	147 456 [36]	147 456 [36]
$24^3 \cdot 32$	95MB	196 608 [48]	184 320 [45]	184 320 [45]
$24^3 \cdot 60$	170MB	—	65 536 [16]	—
$32^3 \cdot 40$	265MB	188 416 [46]	245 760 [60]	—

Tabelle 9.3: Anzahl der Iterationen für die einzelnen Simulationsläufe: Jede vierte Iteration wird gemessen. Jeweils 1024 Messungen bilden (zunächst) einen Block. Oberhalb von 80 MB Speicherbedarf werden die Rechnungen auf der CRAY mühsam (bzw. ab 256 MB undurchführbar).

(999 DM). Auf beiden Maschinen steht eine monatliche Rechenzeit von ca. 80 CPU-Stunden zur Verfügung⁷. Auf der CRAY wird mit dem Simulationsprogramm eine Rechengeschwindigkeit von 180–200 Millionen Fließkomma-Operationen pro Sekunde (MFlops) erreicht. Das Programm ist auf dem Fujitsu-Rechner mit 500–650 MFlops gut einen Faktor drei schneller als auf der CRAY. Die Ursache für den verhältnismäßig niedrigen Vektorisierungsgrad auf der Aachener Maschine liegt im Cluster-Suchalgorithmus und ist schon in Abschnitt 4.2.4 diskutiert worden. Die Rechenzeit für einen Iterationsschritt ist ungefähr proportional zum Gittervolumen. Sie beträgt auf der CRAY Y-MP ca. $6.0 \cdot 10^{-6}$ Sekunden pro Gitterpunkt und auf der SNI S600/20 $1.8 \cdot 10^{-6}$ Sekunden pro Gitterpunkt.

Es werden in der Regel zwischen 100 000 und 250 000 Iterationen (*sweeps*) pro Simulationspunkt (κ, J) und Gittergröße $L^3 \cdot T$ ausgeführt, wobei nach jeder vierten Iteration gemessen wird. Jeweils 1024 Messungen (4096 Iterationen) werden zu einem Block zusammengefaßt und abgespeichert. Eine nachträgliche Erhöhung der Blocklänge ist selbstverständlich möglich (s. Abschn. 9.4). In Tabelle 9.3 sind der Speicherbedarf und die Anzahl der durchgeführten Iterationen für die unterschiedlichen Simulationsparameter aufgelistet. Insbesondere für die größeren Gitter ist eine ausreichende Statistik sichergestellt.

In den Simulationen zum zweiten Teil der Arbeit wird der zuverlässige Kirkpatrick-Stoll-Greenwood Zufallszahlen-Generator [53–55] verwendet, der ausgezeichnet (auf der Basis von Register-Verschiebungen) vektorisiert. Dieser Zufallszahlen-Generator ist einen Faktor 10–50 schneller als RANF() auf der CRAY, der zu den Rechnungen

⁷Darüberhinaus steht uns nach Absprache mit dem Rechenzentrum in Aachen bei geringer Auslastung des Landesvektorrechners die niedrigste Priorität unbeschränkt zur Verfügung.

im ersten Teil benutzt wurde. – Die Fourier-Transformation $\tilde{\Phi}^a(\vec{n}, t)$ des Feldes wird mit einer dreidimensionalen *Fast Fourier Transformation* (FFT) [120] berechnet, die ausgezeichnet vektorisiert.

9.4 Analyse des 2-Teilchen-Energiespektrums

In diesem Abschnitt werden unterschiedliche Berechnungsverfahren für das 2-Teilchen-Energiespektrum diskutiert, die im wesentlichen zu den gleichen Ergebnissen führen. Dadurch sollen – getreu dem Hexameter: „*Quidquid agis, prudenter agas et respice finem*“ – eventuelle systematische Fehlerquellen ausgeschlossen und somit die Qualität der Analyse gesteigert werden (s. Diagramm C auf Seite 146).

Anstatt die Eigenwerte der Korrelationsfunktionsmatrix $\bar{C}(t)$ direkt zu berechnen, wird die Matrix $\mathcal{D}(t, t_0) = \bar{C}^{-\frac{1}{2}}(t_0) \bar{C}(t) \bar{C}^{-\frac{1}{2}}(t_0)$, wie in Abschnitt 9.2.3 beschrieben, für einen kleinen festen Referenzzeitpunkt t_0 (in der Praxis ist $t_0 = 0, 1, 2, \dots$) diagonalisiert. Der Wert des Referenzzeitpunktes t_0 muß klein gehalten werden, um die numerische Stabilität der Eigenwertbestimmung zu garantieren (s. Tabelle 9.4).

Eine Möglichkeit, aus den Eigenwerten $\lambda_\nu(t, t_0)$ von $\mathcal{D}(t, t_0)$, die 2-Teilchen-Energieniveaus zu bestimmen, besteht in der Berechnung (und Mittelung) des Differenzenquotienten des Logarithmus von $\lambda_\nu(t, t_0)$ für große Zeiten t :

$$W_\nu = \ln \left(\frac{\lambda_\nu(t, t_0)}{\lambda_\nu(t+1, t_0)} \right) \quad (9.26)$$

Alternativ dazu werden die Energie-Eigenwerte W_ν aus einem Exponentialfit der Art⁸

$$\lambda_\nu(t, t_0) = e^{-(t-t_0)W_\nu} \quad (9.27)$$

berechnet. Die Ergebnisse beider Alternativen sind annähernd identisch (s. Tabelle 9.4). Deshalb werden in den Tabellen und Bildern am Ende dieses Abschnittes nur die Ergebnisse aus dem Exponentialfit angegeben.

Die Daten werden blockweise zusammengefaßt, die Mittelwerte innerhalb der Blöcke bestimmt, und mit Hilfe der Jackknife-Methode⁹ werden Gesamtmittelwerte und Fehler berechnet. Die Blocklänge l_{blk} , mit der die Daten aus dem Simulationsprogramm ausgegeben werden, beträgt 1024 Messungen. Für die richtige Fehlerabschätzung müssen unabhängige Blockmittelwerte garantiert sein. Deshalb wird die Blocklänge l_{blk} variiert – sprich erhöht – und getestet, wann sich stabile Werte einstellen. Schon mit Blocklänge $l_{blk} = 1024$ scheint die Auswertung stabil zu sein. Da eine genügend hohe Statistik vorhanden ist (s. Tabelle 9.3), wird die Blocklänge in den tabellierten Ergebnissen auf $l_{blk} = 2048$ festgelegt.

Es gibt drei unterschiedliche Ansatzpunkte, die Daten blockweise zu mitteln: Vorausgesetzt, man kennt die richtigen Gesetzmäßigkeiten für die Fehlerfortpflanzung [111], so können die Korrelationsfunktionsmatrizen $\mathcal{D}(t, t_0)$ selbst, ihre Eigenwerte $\lambda_\nu(t, t_0)$ oder die Energieniveaus W_μ aus dem Exponentialfit an die Eigenwerte blockweise zusammengefaßt werden. Diese unterschiedlichen Strategien sind in

⁸Ob man hier stattdessen die Funktion $\cosh((t-t_0-T/2)W_\nu)$ verwendet, hat so gut wie keinen Einfluß auf das Resultat.

⁹Eine direkte Mittelung der Blöcke gibt fast identische Ergebnisse.

Diagramm C auf Seite 146 mit ①, ②, ③ bezeichnet. Die Schwankungen der Energieniveaus gegenüber der Auswahl einer Strategie erweisen sich als vernachlässigbar (s. Tabelle 9.4). Da die Fehlerfortpflanzung bei der Strategie ③ am sichersten erscheint, wird diese Methode für die tabellierten Energiewerte verwendet.

Einen weiteren freien Parameter in der Analyse stellt der Rang $\bar{r}$ der Korrelationsfunktionsmatrix $\mathcal{D}(t, t_0)$ dar, die diagonalisiert wird. Solange der Rang $\bar{r}$ größer als die Anzahl $\bar{z}$ der erwarteten Energieniveaus im elastischen Bereich ist (s. Gl. (9.18)), wird keine Abweichung im Energiespektrum festgestellt. Allerdings muß gewährleistet sein, daß die berücksichtigten 2-Teilchen-Operatoren ausreichend gute Projektionseigenschaften auf das Energiespektrum unterhalb der inelastischen Schwelle besitzen (mehr dazu in Abschnitt 9.5). Auf die Mitnahme des σ -Operators (9.14) darf beispielsweise nicht verzichtet werden.

Um die Empfindlichkeit der Ergebnisse gegenüber der zeitlichen Gitterausdehnung T zu testen, wurden ebenfalls Rechnungen auf einem $24^3 \cdot 60$ Gitter durchgeführt. In den Ergebnissen sind allerdings keine signifikanten Abweichungen im Vergleich zu den Resultaten auf dem $24^3 \cdot 32$ Gitter festzustellen.

Der dynamisch angepaßte Exponentialfit

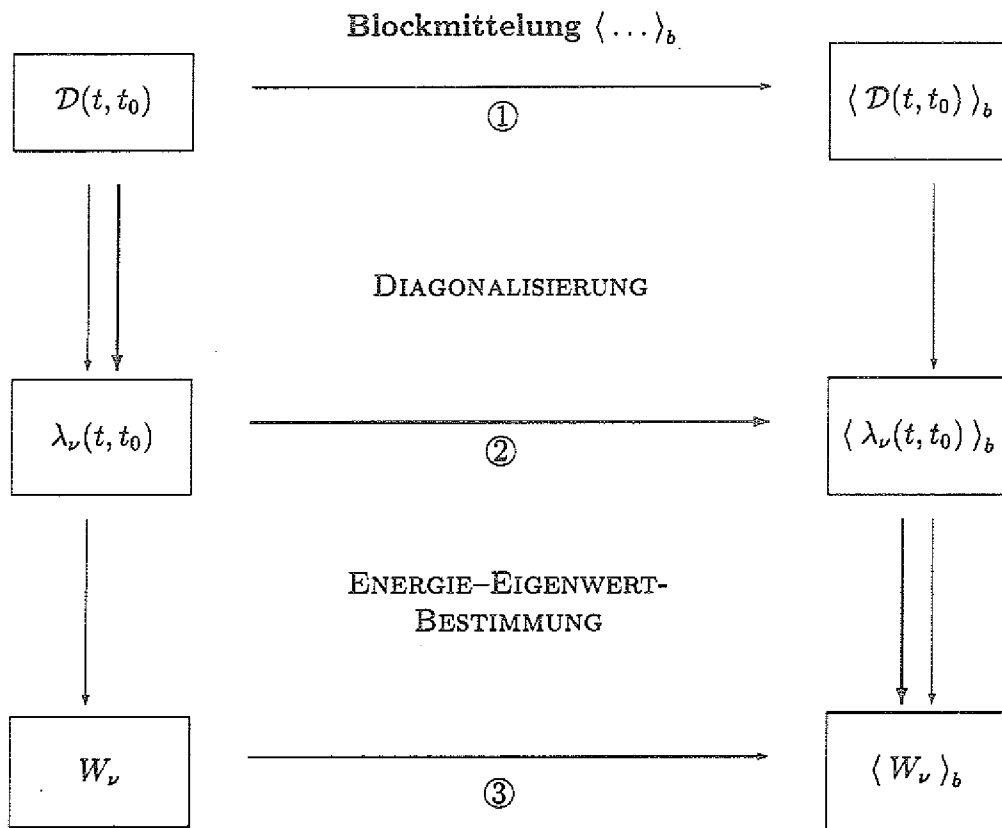
Wir haben eine Methode entwickelt, die obere Intervallgrenze t_{max} des Fit-Bereiches im Exponentialfit dynamisch anzupassen¹⁰ (s. auch [111]). Die Eigenwerte $\lambda_\nu(t, t_0)$ werden so sortiert, daß die zugehörigen Eigenvektoren $u^\nu(t)$ der Korrelationsfunktionsmatrix $\mathcal{D}(t, t_0)$ für unterschiedliche Zeiten t so *parallel wie möglich* sind: idealerweise sollte der Eigenvektor u^ν zu einem Energieeigenwert W_ν natürlich zeitunabhängig sein (s. Abschnitt 9.2.3). Dazu wird für aufeinanderfolgende Zeiten die Matrix der Skalarprodukte $(u^\nu(t), u^\mu(t+1))$ der Eigenvektoren aus den beiden Zeitscheiben berechnet. Ein Maximum an paarweiser Parallelität der Eigenvektoren zu erhalten, ist ein Standard-Zuordnungsproblem, das beispielsweise mit der „Ungarischen Methode“ gelöst werden kann¹¹ [117]:

$$\begin{aligned} & \max \sum_{\nu, \mu} x_{\mu\nu} (u^\nu(t), u^\mu(t+1)) \\ & \text{mit} \quad \sum_{\nu} x_{\mu\nu} = \sum_{\mu} x_{\mu\nu} = 1 \quad \text{und} \quad x_{\mu\nu} \in \{0, 1\}. \end{aligned} \quad (9.28)$$

Die Sortierung der Eigenwerte gemäß der Parallelität der zugehörigen Eigenvektoren sollte äquivalent zu einer Sortierung nach der Größe der Eigenwerte sein, vorausgesetzt die Eigenwerte wurden zur Zeit t_0+1 nach diesem Kriterium sortiert. Als Folge der statistischen Ungenauigkeit der Messung der Korrelationsfunktionsmatrix für große Zeiten sollte die Äquivalenz der beiden Kriterien für eine Zeit $t = t_{max}+1$ gebrochen sein. Dies legt – wie Abbildung 9.3 zeigt – die obere Bereichsgrenze t_{max} des Fit-Intervalles fest.

¹⁰Von unten ist das Intervall durch t_0 begrenzt.

¹¹Die „Ungarischen Methode“ ist in diesem Fall einfacher zu programmieren als der ebenfalls anwendbare Simplex-Algorithmus. In unserem Analyse-Programm wird bisher nur eine Näherung, die einfache Greedy-Heuristik, verwendet.

**Variationen:**

- Variation des Referenzzeitpunktes t_0
- Auswahl des Fits (9.27) oder (9.26)
- Veränderung der Blocklänge l_{blk} : 1024, 2048, 4096, 8192, ...
- Wahl der Strategie ①, ② oder ③
- Variation des Ranges $\bar{r} > \bar{r}$ der Korrelationsfunktionsmatrix
- Vergrößerung der zeitlichen Gitterausdehnung T
- Wahl der 2-Teilchen-Wellenfunktion (9.10) oder (9.11)
- 2-Cluster-Methode (s. Abschnitt 9.2.3)

Diagramm C: Unterschiedliche Strategien zur Blockmittelung bei der Bestimmung des 2-Teilchen-Energiespektrums und eine Liste der verschiedenen Tests, die zusammen mit Jörg Westphalen zur Abschätzung systematischer Fehler entwickelt worden sind (mehr dazu in [111]).

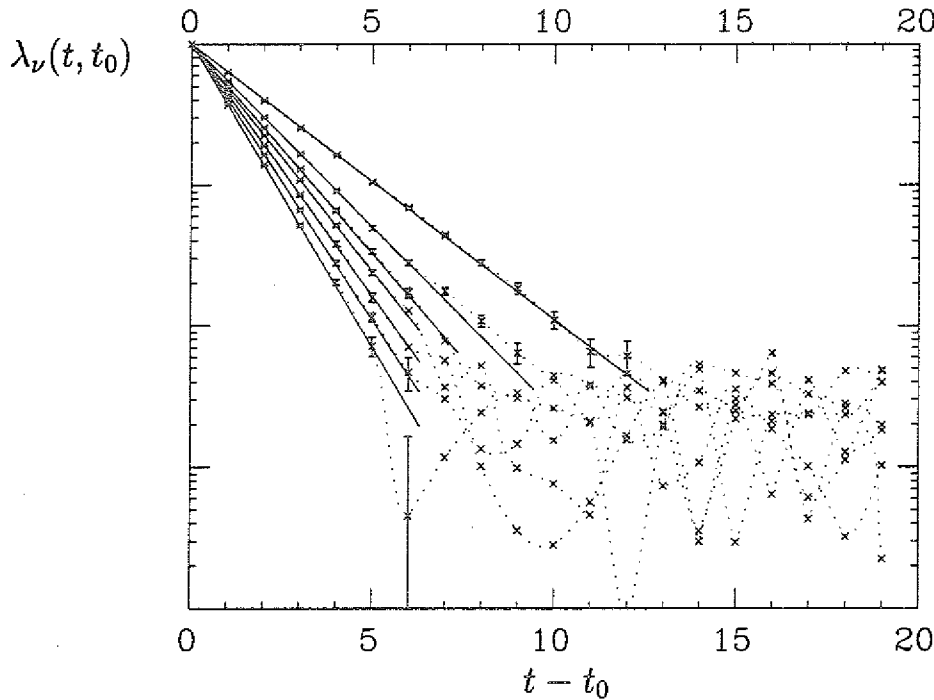


Abbildung 9.3: Der dynamisch angepaßte Fit an die (gemittelten) Eigenwerte $\lambda_\nu(t, t_0)$ der Korrelationsfunktionsmatrix $\mathcal{D}(t, t_0)$: Die Eigenwerte in den einzelnen Zeitscheiben sind nach dem Kriterium der größtmöglichen Parallelität der Eigenvektoren durch gepunktete Linien miteinander verbunden. Kreuzungen der Linien implizieren einen Widerspruch zur als äquivalent angenommenen Sortierung nach der Größe. Daraus wird t_{max} , die obere Intervallgrenze des Exponentialfits – durchgezogene Linie – bestimmt. Die logarithmische Auftragung der Eigenwerte verdeutlicht den exponentiellen Abfall mit der Steigung $-W_\nu$.

Gittereffekte

Vernachlässigt man die Gittereffekte, so kann W_ν mit der Kontinuums-Dispersionsrelation (9.1) weiterverarbeitet werden: $(W_\nu/2)^2 = m_\pi^2 + \vec{k}_\nu^2$. Auf der anderen Seite kann versucht werden, die Abhängigkeiten von der Gitterkonstante wie im Fall des 1-Teilchen-Energiespektrums durch die Gitter-Dispersionsrelation (9.5) in Griff zu bekommen. Für die 2-Teilchen-Energieniveaus lautet die entsprechende Beziehung:

$$\left(2 \sinh \frac{(W_\nu/2)}{2} \right)^2 = m_\pi^2 + \vec{k}_\nu^2. \quad (9.29)$$

Aufgrund des unterschiedlichen Wertebereiches der Impulsbeträge k_ν und der Energieniveaus W_ν unterhalb der inelastischen Schwelle (s. Gl. 8.19) kann angenommen werden, daß der dominierende Anteil der Gittereffekte durch die Ersetzung

$$\frac{W_\nu}{2} \rightarrow 2 \sinh \frac{(W_\nu/2)}{2} \quad (9.30)$$

beseitigt werden kann. Das gilt insbesondere für das niedrigste Energieniveau mit $k_0 \approx 0$. Abbildung 9.8 zeigt am Beispiel des niedrigsten Energieniveaus, daß die Gittereffekte wie erwartet mit zunehmender Entfernung vom kritischen Punkt ($\kappa = \kappa_c, J = 0$) ansteigen, jedoch eine Standardabweichung nicht übersteigen. Für die höheren Energieniveaus unterhalb der inelastischen Schwelle sind die Effekte maximal doppelt so groß. Für den Simulationspunkt ($\kappa = 0.320, J = 0.02$) mit der größten Pion-Masse (und dementsprechend auch den größten Energiewerten) macht dies bei der Berechnung der Streuphasen – wie wir im folgenden Kapitel 10 (Tabelle 10.1) sehen werden – einen meßbaren Unterschied aus. Im Gegensatz zu den Gittereffekten sind die Einflüsse der (meisten) anderen vorhergenannten Tests und Variationen auf das Energiespektrum im elastischen Bereich vernachlässigbar (vgl. Tabelle 9.4).

9.5 Numerische Ergebnisse zum 2-Teilchen-Energiespektrum

Dieser Abschnitt faßt die Ergebnisse der Analyse der 2-Teilchen-Energiespektren in Form von Abbildungen und Tabellen zusammen. In Tabelle 9.4 werden die geringen Einflüsse der im Diagramm C auf Seite 146 aufgelisteten Variationsmöglichkeiten zur Bestimmung des 2-Teilchen-Energiespektrums anhand eines Beispiels dargestellt. Die Variation erfolgt für jeden veränderbaren Freiheitsgrad unabhängig ausgehend von ausgewählten Standardwerten. Aus Tabelle 9.4 lernen wir, den Wert des Referenzzeitpunkts t_0 klein zu halten und ein vollständiges System linear unabhängiger Eigenvektoren zu den Energiewerten im elastischen Bereich sicherzustellen ($\bar{r} > \bar{i}$). „Gitter“ in Tabelle 9.4 bedeutet, daß Gittereffekte insofern berücksichtigt werden, daß das Energiespektrum der Transformation (9.30) unterzogen wird, während „Kontinuum“ heißt, daß diese Effekte ganz ignoriert werden.

Für die tabellierten Energieeigenwerte ist aus der Parameterfreiheit folgende Auswahl getroffen worden, die für das Beispiel in Tabelle 9.4 mit einem * markiert ist:

- Referenzzeitpunkt: $t_0 = 0$
- Exponentialfit gemäß Gleichung (9.27)
- Blocklänge: 2048 (18 – 40 Blöcke ergeben ausreichend Statistik)
- Wahl der Strategie ③ (Mittelung der Energieeigenwerte)
- Rang von $\mathcal{D}(t, t_0)$: mindestens $\bar{r} = \bar{i} + 1$
- Zeitliche Gitterausdehnung $T = 32$ bzw. 40 ($24^3 \cdot 60$ Gitter nur bei $\kappa = 0.315$ und $J = 0.01$)
- „Lüscherische“ 2-Teilchen-Wellenfunktion (9.11) im Isospin-0-Kanal und ebene Wellen (9.10) im Isospin-2-Kanal

$\kappa = 0.315$ $J = 0.010$		2-Teilchen-Energiespektrum					
		ISOSPIN 0					
	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5	W_6
$t_0 = 0$	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		•
$t_0 = 1$	0.452(4)	0.64(1)	0.75(1)	0.86(2)	1.25(7)		
$t_0 = 2$	0.43(3)	0.60(3)	0.70(2)	0.93(5)	1.8(2)		
$l_{blk} = 1024$	0.452(3)	0.643(3)	0.744(3)	0.906(4)	1.22(2)		
$l_{blk} = 2048$	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		•
$l_{blk} = 4096$	0.458(3)	0.646(2)	0.749(3)	0.900(4)	1.21(2)		
$l_{blk} = 8192$	0.457(2)	0.649(3)	0.749(3)	0.898(5)	1.21(2)		
$\bar{r} = 4$	0.455(2)	0.646(2)	0.750(3)	0.991(6)			
$\bar{r} = 5$	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		•
$\bar{r} = 6$	0.455(2)	0.644(3)	0.745(3)	0.896(4)	1.022(4)	1.44(4)	
$\bar{r} = 7$	0.455(2)	0.643(3)	0.744(4)	0.895(4)	1.019(4)	1.141(5)	1.50(5)
①	0.459(1)	0.650(3)	0.748(4)	0.899(4)	1.200(9)		
②	0.455(1)	0.645(2)	0.744(2)	0.899(3)	1.22(2)		
③	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		•
$24^3 \cdot 32$	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		•
$24^3 \cdot 60$	0.454(2)	0.652(2)	0.742(3)	0.909(3)	1.23(2)		
Exp-Fit	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		•
Log-Fit	0.453(2)	0.645(2)	0.744(3)	0.900(4)	1.16(2)		
eb. Wellen	0.454(2)	0.647(2)	0.751(4)	0.905(4)	1.028(4)		
Lüscher Fkt.	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		•
Kontinuum	0.456(2)	0.644(2)	0.747(3)	0.902(4)	1.22(2)		
Gitter	0.457(2)	0.647(3)	0.751(3)	0.909(4)	1.24(2)		

Tabelle 9.4: Das 2-Teilchen-Energiespektrum (im Isospin-0-Kanal) im Vergleichstest bei unterschiedlichen Werten des Referenzzeitpunktes t_0 , der Blocklänge l_{blk} und des Ranges $\bar{r}$ der Korrelationsfunktionsmatrix. Weitere Unterscheidungskriterien sind die verschiedenen Fitmethoden (9.27) oder (9.26), die beiden Wellenfunktionen sowie außerdem die Variation der Strategie zur Blockmittelbildung (s. Diagramm C auf Seite 146). Es sind zwei Gitter mit verschiedener Zeitausdehnung, das $24^3 \cdot 32$ und das $24^3 \cdot 60$ Gitter, bei ($\kappa=0.315$, $J=0.01$) miteinander verglichen worden. Mit • sind die Parameter markiert, mit denen die in Abschnitt 9.5 tabellierten Endergebnisse für das 2-Teilchen-Energiespektrum erhalten werden. Die Daten in den markierten Referenzzeilen sind also der Übersicht halber mehrfach angegeben.

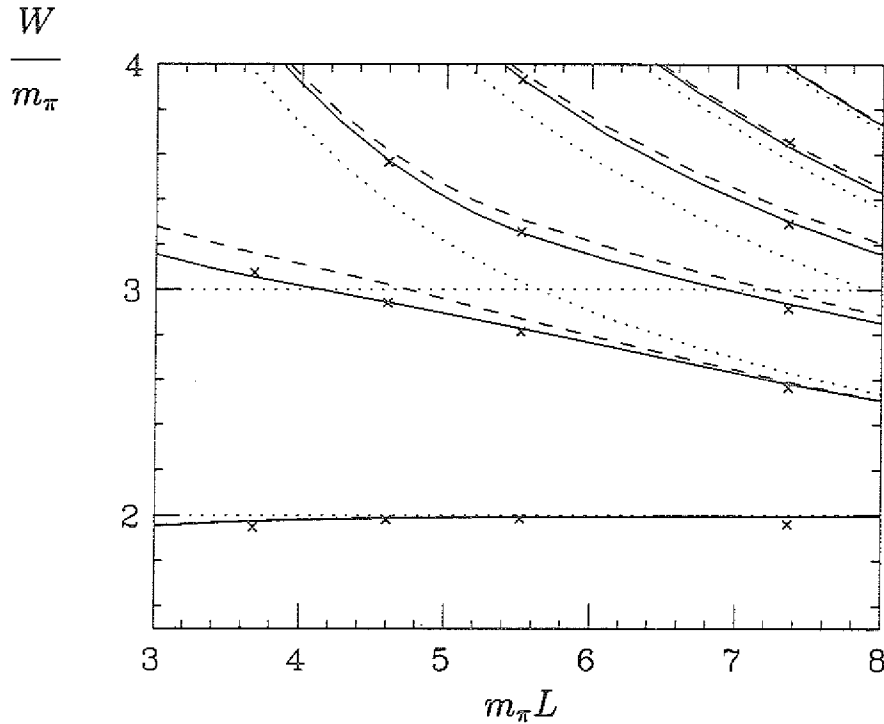


Abbildung 9.4: Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum im Isospin-0-Kanal für den Simulationspunkt ($\kappa = 0.315$, $J = 0.010$). Die Daten werden ausgezeichnet durch die störungstheoretischen Rechnungen (durchgezogene Linien) auf der Grundlage der Ergebnisse aus Kapitel 10 (Tabelle 10.1) beschrieben. Gepunktet ist zum Vergleich das freie und gestrichelt das störungstheoretisch auf Basis der Schätzwerte aus (Tabelle 9.2) vorhergesagte Energiespektrum eingezeichnet. Die Lage der σ -Resonanzenergie m_σ wird durch die waagerechte, gepunktete Linie bei $W \approx 3m_\pi$ angedeutet. ~ Die Fehler der Daten sind kleiner als die Symbole.

9.5.1 Das gemessene 2-Teilchen-Energiespektrum

Die Korrelationsfunktionsmatrizen werden nach den o.a. Kriterien analysiert. Die resultierenden Werte für die 2-Teilchen-Energiespektren in beiden untersuchten Isospin-Kanälen sind in den Tabellen 9.5 bis 9.7 aufgelistet, wobei Gittereffekte (zunächst) ignoriert werden. Diese Endergebnisse bilden im folgenden Kapitel 10 den Ausgangspunkt für die Berechnung der Streuphasen und für die Bestimmung der Resonanzparameter m_σ und Γ_σ (bzw. der Kopplung g_R). Zum Vergleich sind in den Tabellen 9.5 bis 9.7 die Energieniveaus aufgeführt, die störungstheoretisch auf der Grundlage der Ergebnisse aus Kapitel 10 (Tabelle 10.1) berechnet werden.

In Abbildung 9.9 werden die 2-Teilchen-Energiespektren auf einen Blick graphisch dargestellt und mit den störungstheoretischen Vorhersagen verglichen, die Abbildungen 9.4 und 9.5 zeigen die Spektren für den Simulationspunkt ($\kappa = 0.315$, $J = 0.010$) noch einmal vergrößert:

- Das niedrigste 2-Teilchen-Energieniveau stellt den Grundzustand dar, der bei der Diskussion der Streulängen relevant wird (s. Abschnitt 9.5.3).

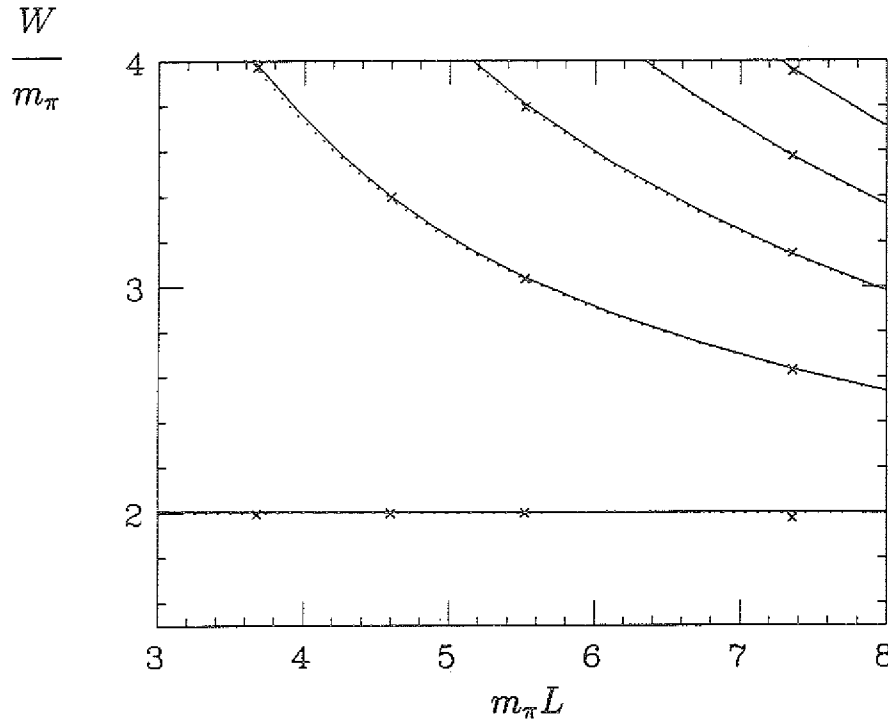


Abbildung 9.5: Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum im Isospin-2-Kanal für den Simulationspunkt ($\kappa = 0.315$, $J = 0.010$). Die Daten werden ausgezeichnet durch die störungstheoretischen Rechnungen (durchgezogene Linien) auf der Grundlage der Ergebnisse aus Kapitel 10 (Tabelle 10.1) beschrieben. Störungstheoretische Rechnungen auf Basis der Schätzwerte aus (Tabelle 9.2) ergeben mit dem Auge nicht unterscheidbare Vorhersagen. Gepunktet ist zum Vergleich das freie Energiespektrum eingezeichnet. – Die Fehler der Daten sind kleiner als die Symbole.

- Die gemessenen Energiewerte unterhalb der inelastischen Schwelle $4m_\pi$ werden als Kreuze eingezeichnet, wobei die Fehler kleiner als die Symbole sind. Dabei werden die Gittereffekte durch die Ersetzung (9.30) berücksichtigt¹².
- Die Energieniveaus, die unter Zuhilfenahme der Ergebnisse aus Kapitel 10 (Tabelle 10.1) störungstheoretisch (s. Abschnitt 8.3) berechnet werden, sind als durchgezogene Linien eingezeichnet.

Wir sehen im **Isospin-0-Resonanzkanal** das erwartete Verhalten (vgl. Abb. 8.3): Das erste und das zweite Energie-Niveau nähern sich an, vermeiden aber ein Kreuzen der Linien (*avoided level crossing*). Eingangs wurde behauptet, daß das 2-Teilchen-Energiespektrum eine äquivalente Beschreibung von elastischen Streuprozessen bietet wie die Streuphasen. Wie werden also beispielsweise aus Abbildung 9.4 die Resonanzparameter abgelesen?

Im Prinzip kann als Resonanzenergie die Stelle definiert werden, an der das Energiespektrum ein Plateau ausbildet. Die Breite der Resonanz ist proportional zur Steigung des 2-Teilchen-Energieniveaus bei der Resonanzenergie [104]. Bei der geringen

¹²Die Abweichungen von den in den Tabellen 9.5 bis 9.7 angegebenen Werten sind gering und mit dem Auge kaum auszumachen.

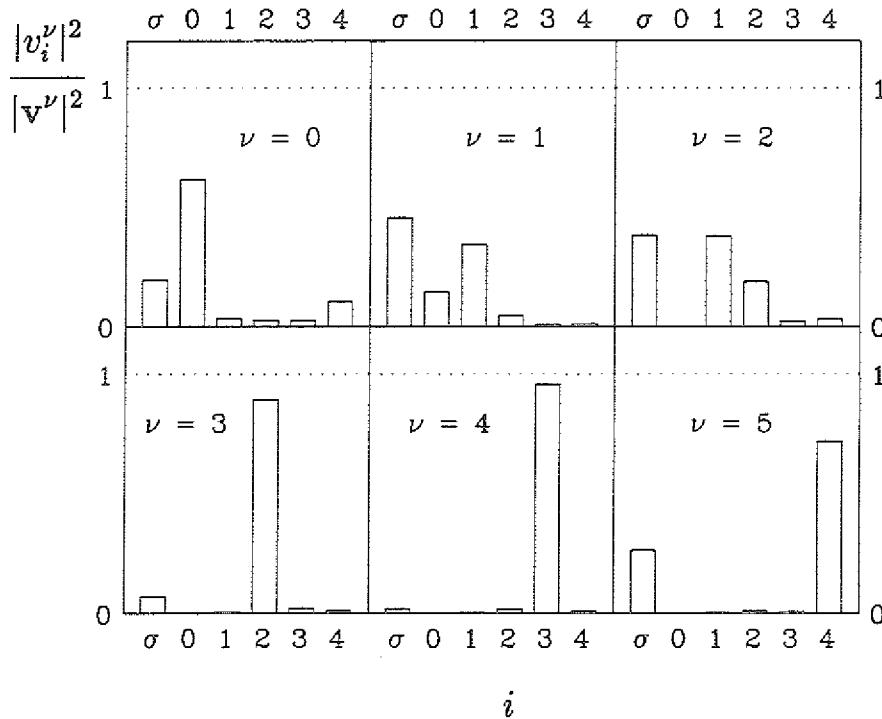


Abbildung 9.6: Die Betragsquadrate der i -ten Komponenten $|v_i^\nu|^2/|v^\nu|^2$ der normierten Eigenvektoren im Isospin-0-Kanal mit $\nu = 0, 1, \dots$, für die ebenen Wellen. Die Eigenzustände des ersten und zweiten Niveaus mischen im Resonanzbereich, da die Resonanzenergie für ($\kappa=0.315$, $J=0.010$, $L=24$) zwischen den freien Energieniveaus liegt (s. Abb. 9.4).

Zahl von Datenpunkten erweist sich dieser Zugang jedoch als wenig praktikabel. Im nächsten Kapitel wird beschrieben, wie die Resonanzparameter im Isospin-0-Kanal aus den zugehörigen Streuphasen bestimmt werden. Die gepunktete, waagerechte Linie bei $W \approx 3m_\pi$ entspricht der Resonanzmasse des σ -Teilchens, wie sie später aus dem Fit an die Streuphasen erhalten wird. Sie gibt eine Vorstellung davon, daß die Energieniveaus ein Resonanzplateau bilden.

Um die Werte besser mit den störungstheoretischen Vorhersagen vergleichen zu können, werden die Energieniveaus für den Simulationspunkt ($\kappa=0.315$, $J=0.010$) noch einmal vergrößert in den Abbildungen 9.4 und 9.5 gezeigt. Durch gestrichelte Linien wird hier zusätzlich im Isospin-0-Kanal das störungstheoretisch auf Basis der Schätzwerte aus Tabelle 9.2 vorhergesagte Energiespektrum eingezeichnet. Der quantitative Vergleich dieser störungstheoretischen Vorhersagen mit den gemessenen Energiewerten fällt weniger zufriedenstellend aus. Dies mag damit zusammenhängen, daß die Zerfallsbreite der σ -Resonanz relativ groß ist (s. Kapitel 10). Die Daten lassen sich jedoch ausgezeichnet erklären, wenn die im nächsten Kapitel berechneten Resonanzparameter m_σ und Γ_σ (bzw. g_R) berücksichtigt werden.

Auch im Isospin-2-Kanal werden die Erwartungen bestätigt: das Energiespektrum wird sehr gut durch das störungstheoretisch vorhergesagte Energiespektrum beschrieben, wobei unwesentlich ist, ob die Parameter aus Tabelle 9.2 oder Tabelle 10.1 zugrundegelegt werden. Allerdings weichen die Daten auch vom freien Ener-

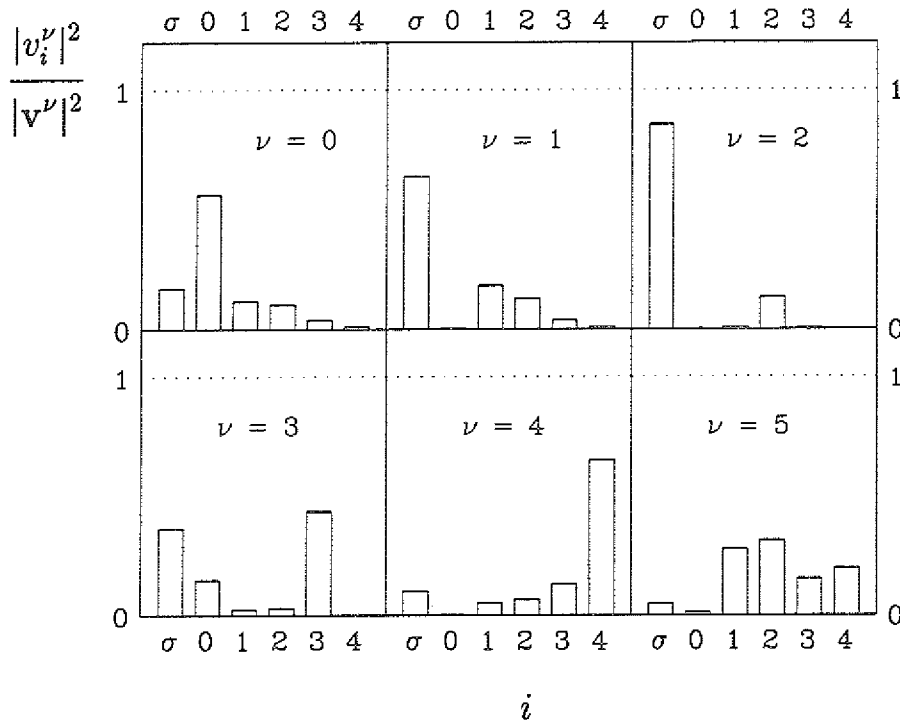


Abbildung 9.7: Die Betragsquadrate der i -ten Komponenten $|v_i^\nu|^2 / |v^\nu|^2$ der normierten Eigenvektoren im Isospin-0-Kanal mit $\nu = 0, 1, \dots$, für die „Lüscherschen“ Wellenfunktionen ($\kappa = 0.315$, $J = 0.010$, $L = 24$). Für die beiden Energieeigenwerte W_1 und W_2 , die im Bereich der Resonanz liegen (s. Abb. 9.4), trägt der 2-Teilchen-Operator O_σ mit dem größten Gewicht bei.

giespektrum nur unwesentlich ab (s. Abbildung 9.5). Wie Abbildung 9.9 zeigt, ist – in beiden Isospin-Kanälen – der Verlauf der Energieniveaus für alle untersuchten Simulationspunkte ähnlich.

9.5.2 Die Qualität der Wellenfunktionen

Für die beiden untersuchten Wellenfunktionen (9.10) und (9.11) ergeben sich innerhalb der Standardabweichung die gleichen Energiewerte. Das kann als Maß für die ausgezeichnet funktionierende Diagonalisierungsprozedur betrachtet werden. Eine der zu untersuchenden Fragestellungen war, festzustellen, ob die „Lüscherschen“ Wellenfunktionen (9.11) im Isospin-0-Kanal ein verbessertes Projektionsverhalten auf die letztendlich gemessenen Energieeigenzustände besitzen als die ebenen Wellen (9.10). Dazu wird C.R. Gattlinger und C.B. Lang [97] folgend zunächst auf die Eigenvektoren $v^\nu = \tilde{C}^{-\frac{1}{2}}(t_0)u^\nu$ des ursprünglichen Problems zurücktransformiert. In den Abbildungen 9.6 und 9.7 werden die Betragsquadrate der i -ten Komponenten $|v_i^\nu|^2 / |v^\nu|^2$ der normierten Eigenvektoren im Isospin-0-Kanal, links oben mit dem Eigenvektor v^0 zum Energieniveau W_0 beginnend, für $\nu = 0, 1, \dots, 5$ gezeigt. Sie geben die Gewichte an, mit denen die 2-Teilchen-Operatoren O_i ($\sigma, 0, 1, \dots, 4$) zu den Energieeigenzuständen $|\nu\rangle$ beitragen. Da die gemessenen, normierten Eigenvektoren

v'' nicht völlig zeitunabhängig sind (siehe „der dynamisch angepaßte Exponentialfit“ in Abschnitt 9.4), werden in Abbildung die über das Intervall $[t_0, t_{max}]$ zeitlich gemittelten Betragsquadrate aufgetragen.

Die Beiträge der 2-Teilchen-Operatoren O_i mit den ebenen Wellen mischen sich für Energiewerte im Resonanzbereich, wie für den ersten und zweiten Energieeigenwert oben in Abbildung 9.6 deutlich sichtbar ist. Diesen Zusammenhang können wir verstehen, wenn wir das entsprechende Energiespektrum für den Simulationspunkt ($\kappa = 0.315$, $J = 0.010$, $L = 24$) in Abbildung 9.4 betrachten: Die gepunkteten Linien für die Resonanzenergie und das erste freie Niveau kreuzen sich und dementsprechend tragen die beiden Operatoren O_σ und O_1 gleichermaßen zu den beiden benachbarten gemessenen Energieniveaus W_1 und W_2 bei¹³.

Inwieweit mit den Lüscherschen Wellenfunktionen im Bereich der Resonanzenergie (oben in Abbildung 9.7) ein besseres Projektionsverhalten erreicht werden kann, hängt entscheidend von der Wahl der sie charakterisierenden Parameter q_i^2 ab. Da diese Größen aus dem störungstheoretisch vorhergesagten Energiespektrum bestimmt werden, das mit Hilfe der Schätzwerte aus Tabelle 9.2 berechnet wird, kann nicht unbedingt mit einem verbesserten Projektionsverhalten gerechnet werden. Des weiteren ist zu beachten, daß die Lüscherschen Wellenfunktionen (9.11) im Vergleich zu den ebenen Wellen kein Orthogonalsystem bilden. Für die beiden Energieeigenwerte W_1 und W_2 , die im Bereich der Resonanz liegen (s. Abb. 9.4), trägt der 2-Teilchen-Operator O_σ mit dem größten Gewicht bei. (Nur) in diesem Sinne scheinen die 2-Teilchen-Operatoren O_i ($i = 0, \dots, 4$) mit den Lüscherschen Wellenfunktionen im Resonanzbereich ein besseres Projektionsverhalten zu besitzen.

9.5.3 Streulängen

In Abbildung 9.8 werden die niedrigsten 2-Teilchen-Energieniveaus für die beiden untersuchten Isospin-Kanäle als Funktionen von $1/L^3$ aufgetragen, um mit der in Gleichung (8.23) vorhergesagte Volumenabhängigkeit besser vergleichen zu können. Für das niedrigste Energieniveau umgeschrieben lautet Gl. (8.23)

$$\frac{W}{m_\pi} = 2 - \frac{4\pi}{m_\pi^2 L^2} \frac{a_0}{L} \left(1 + \frac{c_1 a_0}{L} + \frac{c_2 a_0^2}{L^2} \right) + \mathcal{O}(L^{-6}) \quad (9.31)$$

mit den Konstanten $c_1 = -2.837297$ und $c_2 = 6.375183$ (s. Gl. (8.24)). Ein Fit mit der Formel (9.31) an die gemessenen Energiedaten scheint keine zuverlässigen Ergebnisse für die Streulängen zu liefern, da in den meisten Fällen selbst eine Konstante (d.h. Streulänge Null) mit den Werten verträglich ist. Zum Vergleich mit den Daten sind in Abbildung 9.8 die störungstheoretischen Vorhersagen gemäß Gl. (8.35) eingezeichnet. Die Skala $W = 2m_\pi$ wird durch die Pion-Masse aus dem Fit an das 1-Teilchen-Energiespektrum definiert. Die leichten Verschiebungen der Kurven nach oben oder unten können ihre Ursache in der Unsicherheit der Bestimmung von m_π haben (vgl. Tabelle 9.2).

¹³Im Gegensatz zu den freien Niveaus vermeiden die Energieniveaus für die Resonanzstreuung ein Kreuzen der Linien (*avoided level crossing*).

Es wäre ein leichtes, Rechnungen auf kleineren Gittern durchzuführen, und damit innerhalb der statistischen Fehler verlässliche Werte für die Streulängen zu messen. Das erklärte Ziel dieser Untersuchung war es jedoch, die für die (Resonanz-)Streuung relevanten höheren Energieniveaus zu berechnen, was nur auf größeren Gittern möglich ist. Abbildung 9.8 veranschaulicht des weiteren, daß nicht nur die Volumenabhängigkeiten, sondern auch Gittereffekte des niedrigsten Energieniveaus innerhalb der Meßgenauigkeit vernachlässigbar sind.

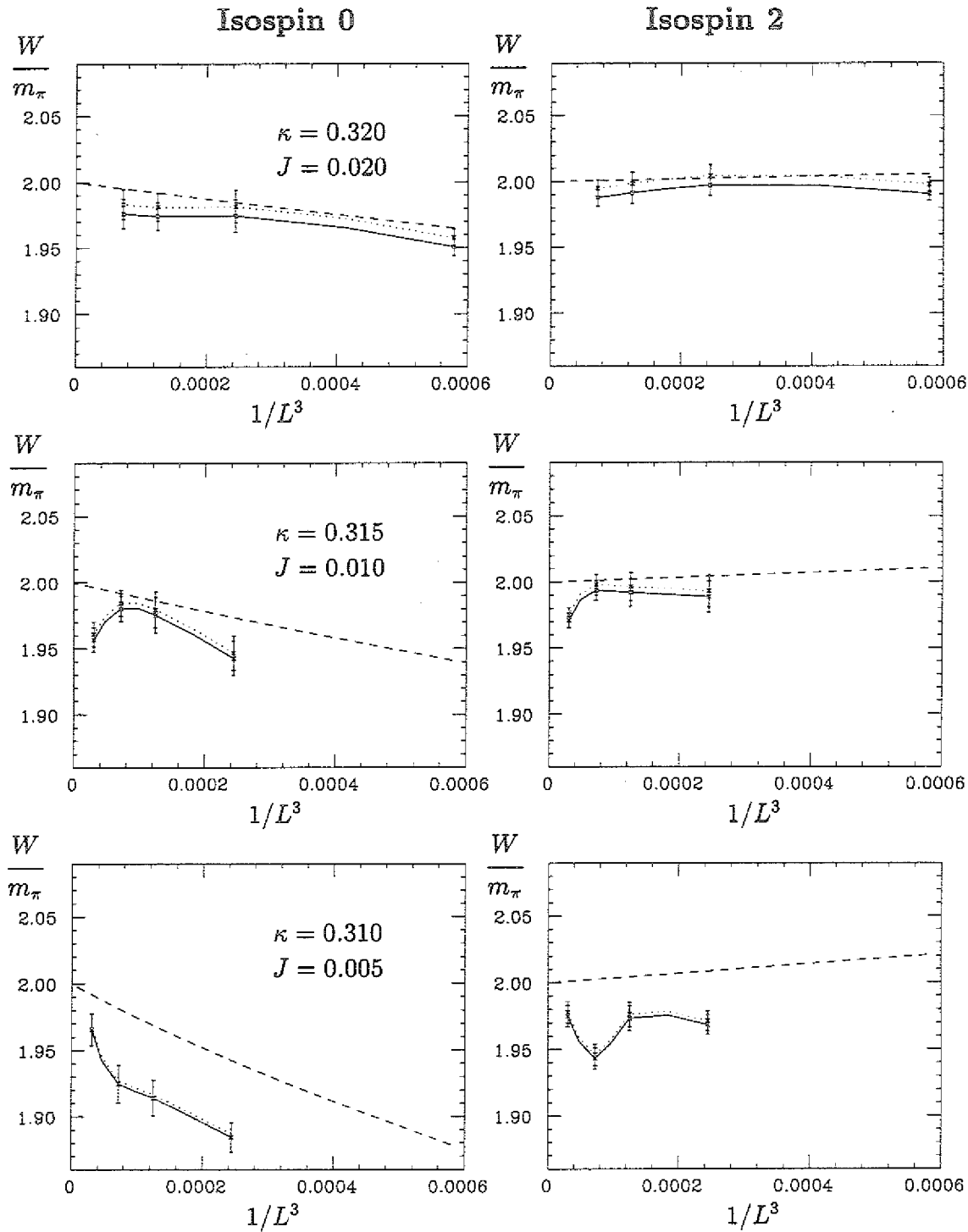


Abbildung 9.8: Alle Daten zu den niedrigsten 2-Teilchen-Energieniveaus auf einen Blick, links zum Isospin 0, rechts zum Isospin 2. Zum Vergleich sind als gestrichelte Linien die Vorhersagen aus der Störungstheorie auf der Grundlage der Ergebnisse aus Tabelle 10.1 eingezeichnet. Die gepunktet eingezeichneten Linien beschreiben die Abweichungen der Energieniveaus bei Berücksichtigung der Gittereffekte (s. Gl. (9.30)), die bei Annäherung an den kritischen Punkt ($\kappa = 0.304, J = 0.000$), d.h. von oben nach unten abnehmen. Es lässt sich nur tendenziell das Vorzeichen der Streulängen errahnen: a_0^0 im Isospin-0-Kanal ist positiv und a_0^2 im Isospin-2-Kanal negativ.

$$\kappa = 0.310$$

$$J = 0.005$$

2-Teilchen-Energiespektrum

Isospin 0

	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5	W_6
$16^3 \cdot 32$	0.352(2)	0.548(2)	1.032(8)				
	0.363	0.548	0.903				
$20^3 \cdot 32$	0.358(2)	0.526(3)	0.753(2)	1.15(2)			
	0.368	0.531	0.759	0.99			
$24^3 \cdot 32$	0.360(3)	0.520(3)	0.661(3)	0.849(4)	1.28(5)		
	0.371	0.519	0.669	0.853	0.99		
$32^3 \cdot 40$	0.368(2)	0.493(2)	0.566(3)	0.681(2)	0.780(5)	1.12(5)	
	0.373	0.498	0.570	0.689	0.785	0.87	

Isospin 2

	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5
$16^3 \cdot 32$	0.368(1)	0.871(1)	1.165(2)			
	0.376	0.877	1.182			
$20^3 \cdot 32$	0.369(2)	0.730(1)	0.962(1)	1.142(2)		
	0.375	0.736	0.971	1.154		
$24^3 \cdot 32$	0.363(2)	0.641(1)	0.829(1)	0.973(1)	1.091(1)	
	0.375	0.646	0.834	0.984	1.114	
$32^3 \cdot 40$	0.369(1)	0.538(1)	0.667(1)	0.771(1)	0.861(1)	0.949(1)
	0.374	0.544	0.672	0.778	0.871	0.958

Tabelle 9.5: Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum für $\kappa = 0.310$ und $J = 0.005$ mit den eingangs in Abschnitt 9.5 angegebenen Parametereinstellungen für die Analyse. In den jeweiligen zweiten Zeilen stehen (ohne Angabe von Fehlern) die störungstheoretischen Vorhersagen des Energiespektrums auf der Grundlage der Ergebnisse aus Tabelle 10.1. Lediglich bei einigen höheren Energieniveaus, die jedoch über der Vielteilchenschwelle $W > 4m_\pi = 0.748(3)$ liegen, sind größere Abweichungen festzustellen. – Die angegebenen Fehler sind rein statistischer Natur.

$$\kappa = 0.315$$

$$J = 0.010$$

2-Teilchen-Energiespektrum

Isospin 0

	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5	W_6
$16^3 \cdot 32$	0.447(3)	0.703(4)	0.948(4)	1.36(2)			
	0.454	0.701	0.952	1.24			
$20^3 \cdot 32$	0.454(3)	0.673(3)	0.814(4)	1.024(4)	1.41(4)		
	0.457	0.676	0.821	1.035	1.20		
$24^3 \cdot 32$	0.455(2)	0.644(3)	0.745(3)	0.896(4)	1.022(4)	1.44(4)	
	0.458	0.649	0.747	0.904	1.030	1.15	
$32^3 \cdot 40$	0.450(2)	0.588(2)	0.667(2)	0.753(2)	0.834(2)	0.912(3)	1.21(2)
	0.459	0.593	0.675	0.759	0.835	0.916	1.01

Isospin 2

	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5
$16^3 \cdot 32$	0.457(3)	0.905(2)	1.193(3)	1.413(3)		
	0.461	0.916	1.211	1.441		
$20^3 \cdot 32$	0.458(2)	0.776(2)	0.994(1)	1.168(3)	1.306(3)	
	0.460	0.782	1.006	1.184	1.340	
$24^3 \cdot 32$	0.458(2)	0.694(1)	0.865(1)	1.012(2)	1.127(2)	1.240(2)
	0.460	0.699	0.875	1.019	1.145	1.263
$32^3 \cdot 40$	0.453(1)	0.602(1)	0.720(1)	0.817(1)	0.901(1)	0.987(1)
	0.460	0.606	0.723	0.822	0.911	0.994

Tabelle 9.6: Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum für $\kappa = 0.315$ und $J = 0.010$ mit den eingangs in Abschnitt 9.5 angegebenen Parametereinstellungen für die Analyse. In den jeweiligen zweiten Zeilen stehen (ohne Angabe von Fehlern) die störungstheoretischen Vorhersagen des Energiespektrums auf der Grundlage der Ergebnisse aus Tabelle 10.1. Lediglich bei einigen höheren Energieniveaus, die jedoch über der Vielteilchenschwelle $W > 4m_\pi = 0.920(3)$ liegen, sind größere Abweichungen festzustellen. – Die angegebenen Fehler sind rein statistischer Natur.

$$\kappa = 0.320$$

$$J = 0.020$$

2-Teilchen-Energiespektrum

Isospin 0

	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5	W_6
$12^3 \cdot 32$	0.575(2)	0.888(4)	1.240(3)	1.80(2)			
	0.579	0.894	1.261	1.652			
$16^3 \cdot 32$	0.582(4)	0.844(5)	1.031(5)	1.29(1)	1.79(6)		
	0.585	0.852	1.038	1.30	1.50		
$20^3 \cdot 32$	0.582(3)	0.802(4)	0.920(4)	1.096(5)	1.248(6)	1.60(6)	
	0.587	0.810	0.928	1.109	1.256	1.40	
$24^3 \cdot 40$	0.582(3)	0.756(3)	0.861(3)	0.977(4)	1.101(8)	1.192(5)	1.51(6)
	0.588	0.767	0.869	0.992	1.100	1.209	1.33

Isospin 2

	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5
$12^3 \cdot 32$	0.587(2)	1.189(1)	1.558(2)	1.842(3)		
	0.591	1.211	1.607	1.914		
$16^3 \cdot 32$	0.589(2)	0.978(1)	1.246(2)	1.449(2)	1.608(3)	
	0.590	0.986	1.265	1.487	1.680	
$20^3 \cdot 32$	0.587(3)	0.857(2)	1.059(2)	1.221(2)	1.353(2)	1.487(3)
	0.590	0.864	1.071	1.240	1.390	1.529
$24^3 \cdot 40$	0.586(2)	0.786(2)	0.940(1)	1.074(2)	1.185(2)	1.292(2)
	0.590	0.790	0.949	1.083	1.203	1.315

Tabelle 9.7: Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum für $\kappa = 0.320$ und $J = 0.020$ mit den eingangs in Abschnitt 9.5 angegebenen Parametereinstellungen für die Analyse. In den jeweiligen zweiten Zeilen stehen (ohne Angabe von Fehlern) die störungstheoretischen Vorhersagen des Energiespektrums auf der Grundlage der Ergebnisse aus Tabelle 10.1. Lediglich bei einigen höheren Energieniveaus, die jedoch über der Vielteilchenschwelle $W > 4m_\pi = 1.179(3)$ liegen, sind größere Abweichungen festzustellen. – Die angegebenen Fehler sind rein statistischer Natur.

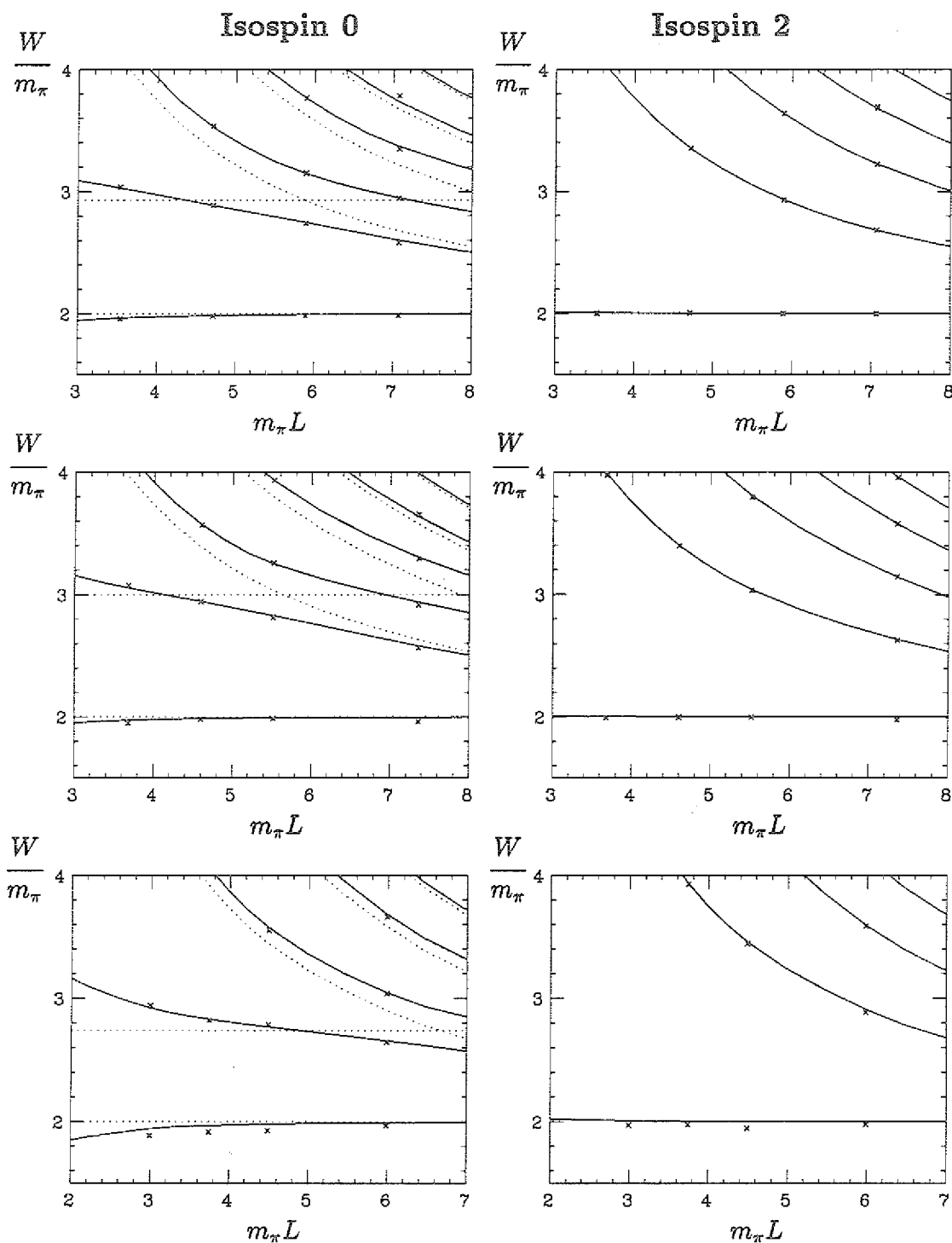


Abbildung 9.9: Alle Daten zu den 2-Teilchen-Energiespektren auf einen Blick. Links ist das Energiespektrum zum Isospin 0 rechts zum Isospin 2 dargestellt. Zum Vergleich sind im Isospin-0-Kanal gepunktet die freien Energieniveaus eingezeichnet. In beiden Isospin-Kanälen und für alle Simulationspunkte ($\kappa=0.320, J=0.020$, oben), ($\kappa=0.315, J=0.010$, in der Mitte) und ($\kappa=0.310, J=0.005$, unten) stimmen die numerischen Daten ausgezeichnet mit den störungstheoretischen Rechnungen überein, im Isospin-0-Kanal allerdings erst, wenn die Ergebnisse für die Resonanzparameter aus Kapitel 10 (Tabelle 10.1) berücksichtigt werden. – Die Fehler der Daten sind kleiner als die Symbole.

Kapitel 10

Die Streuphasen und die σ -Resonanz

Die Schlüsselbeziehung (8.20) wird zusammen mit dem relativistischen Energie-Impuls-Zusammenhang verwendet, um die Streuphasen δ_0^0 und δ_0^2 für Isospin 0 und 2 zu berechnen.

Da die Datenpunkte in Abbildung 9.4 im Bereich der Resonanz sehr dünn angesiedelt sind, werden Resonanzenergie und Zerfallsbreite nicht aus der Lage des Resonanzplateaus und der Steigung der 2-Teilchen-Energieniveaus bei der Resonanzenergie bestimmt [104]. Statt dessen werden die Resonanzparameter im Isospin-0-Kanal aus einem Fit an die Streuphase δ_0^0 gemessen. Durch die Vermessung der Streuphase im Isospin-0-Kanal ist es gelungen, mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden auf dem Gitter ein instabiles Teilchen, das σ -Teilchen, nachzuweisen und seine Masse und seine Zerfallsbreite zu berechnen.

Die gemessenen Werte für die Zerfallsbreite der σ -Resonanz stimmen gut mit den Vorhersagen aus der Störungstheorie in der 1-Schleifen-Näherung überein. Die Werte für die Resonanzmasse liegen systematisch (ca. 5 %) unterhalb der Schätzwerte aus dem Fit an den σ -Propagator im Impulsraum (vgl. Abschn. 9.1). Damit ist die Anwendbarkeit von Lüscher's Methode zur Untersuchung von elastischen Streuprozessen auf endlichen Gittern demonstriert. Das letzte Kapitel dieser Arbeit schließt mit der Zusammenfassung zum zweiten Teil ab.

10.1 Numerische Ergebnisse zur Untersuchung der Streuphasen

Für jedes Gitter mit der Ausdehnung L und für jedes 2-Teilchen-Energieniveau $W_\nu < 4m_\pi$ erhält man mit der Schlüsselbeziehung (8.20)

$$\delta_0^I(k_\nu) = -\phi\left(\frac{k_\nu L}{2\pi}\right) + \nu\pi \quad (10.1)$$

je einen Wert für die Streuphasen δ_0^0 und δ_0^2 im elastischen Bereich $0 < k_\nu/m_\pi < \sqrt{3}$, sofern man $k_\nu(W_\nu)$ über die Energie-Impuls-Beziehung (8.18) berechnet. Die Erfahrungen mit dem 1-Teilchen-Energiespektrum suggerieren, daß Gittereffekte sehr gut

durch die Gitterdispersionsrelation (9.5) beschrieben werden. Dementsprechend wird hier für die 2-Teilchen-Energieniveaus die Gitterdispersionsrelation (9.29) verwendet.

Das Vorgehen zur Berechnung der Streuphasen veranschaulicht Abbildung 10.1. Dort ist die Funktion $-\phi\left(\frac{kL}{2\pi}\right) \bmod \pi$, die wir aus Abbildung 8.2 kennen, als Funktion von k/m_π für jeweils einen festgehaltenen Wert von $m_\pi L$ aufgetragen. In Abbildung 10.1 wurde der Wert von m_π bei ($\kappa=0.315$, $J=0.01$) gewählt, und die dort aufgetragenen Kurven entsprechen den an diesem Punkt simulierten Gittern mit $L=16, 20, 24$ und 32 . Der Wert dieser Funktion für ein 2-Teilchen-Niveau $k_\nu(W_\nu)$ unterhalb der inelastischen Schwelle $k_\nu < \sqrt{3}m_\pi$ definiert die Streuphase bei diesem Impuls (eingezeichnet als ein Datenpunkte in Abb. 10.1). Jeweils ein Phasensprung in der Funktion $-\phi$ entspricht genau einem Energieniveau W_ν , das in Abschnitt 9.5.1 (s. Tabellen 9.5 bis 9.7) gemessen wurde.

Des weiteren verdeutlicht Abbildung 10.1 folgenden Zusammenhang: Je größer die Gitterausdehnung L ist, umso mehr Energieniveaus passen unterhalb die inelastische Schwelle und desto steiler wird die Funktion $-\phi\left(\frac{kL}{2\pi}\right)$. Diese Tatsache wirkt sich entsprechend auf die Fehlerfortpflanzung aus: Für größere Gitter sind in der Regel größere Fehler der Streuphasen zu erwarten. Will man trotzdem verlässliche Streuphasen berechnen, so müssen die Energiewerte W_ν für größere L genauer berechnet werden. Für die hier untersuchten Gittergrößen und Simulationsparameter ist die erforderliche hohe Statistik auf den größeren Gittern gewährleistet (s. Tabelle 9.3). Aber dadurch werden auch die Grenzen der Anwendbarkeit offenbar, sofern man noch größere Gitter realisieren wollte. Zusammengefasst beschreiben die für die unterschiedlichen Gittergrößen L berechneten Werte der Streuphase deren Verlauf in Abhängigkeit von k/m_π .

Die Steilheit der Funktion $-\phi$ hat noch einen weiteren Effekt zur Folge: Zwar liegt die Abhängigkeit des Energiespektrums von der Gitterkonstanten im Bereich der statistischen Fehler, doch bewirkt der Verlauf der Funktion $-\phi$ beim Simulationspunkt ($\kappa=0.320$, $J=0.02$) mit den betragsmäßig größten Werten für das Energiespektrum eine sichtbare Verschiebung der Werte für die Streuphase. Wie in Abbildung 10.2 dargestellt, werden durch die Berücksichtigung der Gittereffekte mittels der Gitterdispersionsrelation (9.29) die Daten, die mit der Energie-Impuls-Beziehung (8.18) im Kontinuum berechnet werden, entlang der gepunkteten Linien $-\phi\left(\frac{k_\nu L}{2\pi}\right) \bmod \pi$, nach unten verschoben. Die Schwierigkeiten bei der Berechnung von $\vec{k}_\nu^2$ ohne die explizite Kenntnis der Komponenten von $\vec{k}$ können umgangen werden, indem man die Struktur der Komponenten des nächstliegenden freien Niveaus $j \approx (L/2\pi)^2 \vec{k}^2$ aus Tabelle 9.1 zugrunde legt. Insbesondere im Isospin-2-Kanal, dessen Energiespektrum nur geringfügig vom freien Spektrum abweicht, hat sich dieses Verfahren bewährt (s. Abb. 10.2).

Für die beiden Isospin-Kanäle und alle drei untersuchten Simulationspunkte sind die Endergebnisse für die Streuphasen in Abbildung 10.4 dargestellt. Die gemessenen Streuphasen im Isospin-2-Kanal stimmen schon erstaunlich gut mit dem störungstheoretisch vorhergesagten Verlauf (8.33) überein, selbst wenn man die Schätzwerte

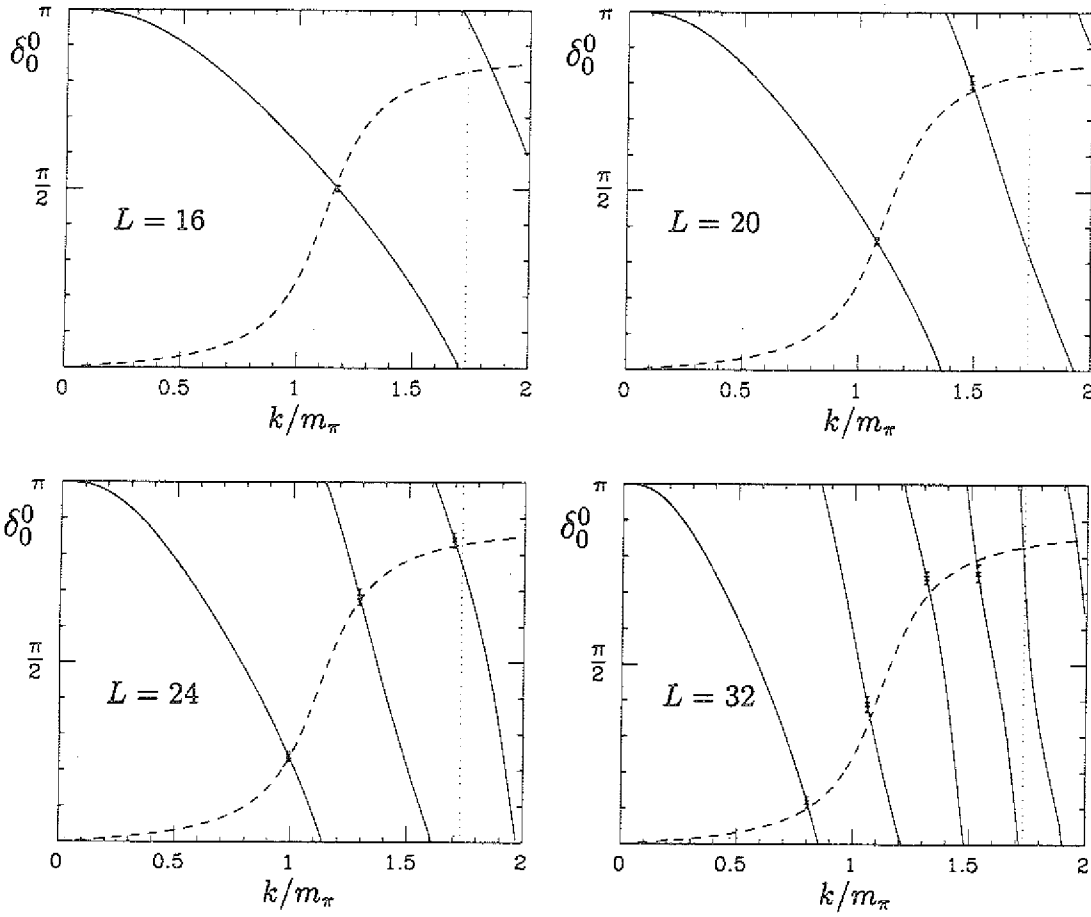


Abbildung 10.1: Die Funktion $-\phi\left(\frac{kL}{2\pi}\right) \bmod \pi$, in Abhängigkeit von k/m_π für jeweils einen festgehaltenen Wert von $m_\pi L$. Hier wurde der Wert von m_π beim Simulationspunkt ($\kappa=0.315$, $J=0.01$) gewählt, und die aufgetragenen Kurven entsprechen den Gittern mit $L=16, 20, 24$ und 32 . Die Funktionswerte für die gemessenen Energiewerte aus Tabelle 9.6 bestimmen den Wert der Streuphase bei diesen Energien. Die Fehler der Streuphasen ergeben sich aus der Steigung der Funktion ϕ . Als gestrichelte Kurve ist der Verlauf der Streuphase aus dem Fit mit dem störungstheoretischen Ansatz (8.32) dargestellt (vgl. mit Abbildung 8.2). Die gepunktete vertikale Linie markiert die inelastische Schwelle.

$\tilde{m}_\sigma$ und $\tilde{g}_R$ aus Tabelle 9.2 berücksichtigt. Die Verwendung der Gitterdispersionsrelation (9.29) ist hierbei wesentlich. Im Gegensatz dazu zeigen die Daten im Isospin-0-Kanal (s. Abbildung 10.3), daß die Werte für die Resonanzmasse m_σ offensichtlich unterhalb der Schätzwerte $\tilde{m}_\sigma$ aus dem Fit an den σ -Propagator im Impulsraum liegen.

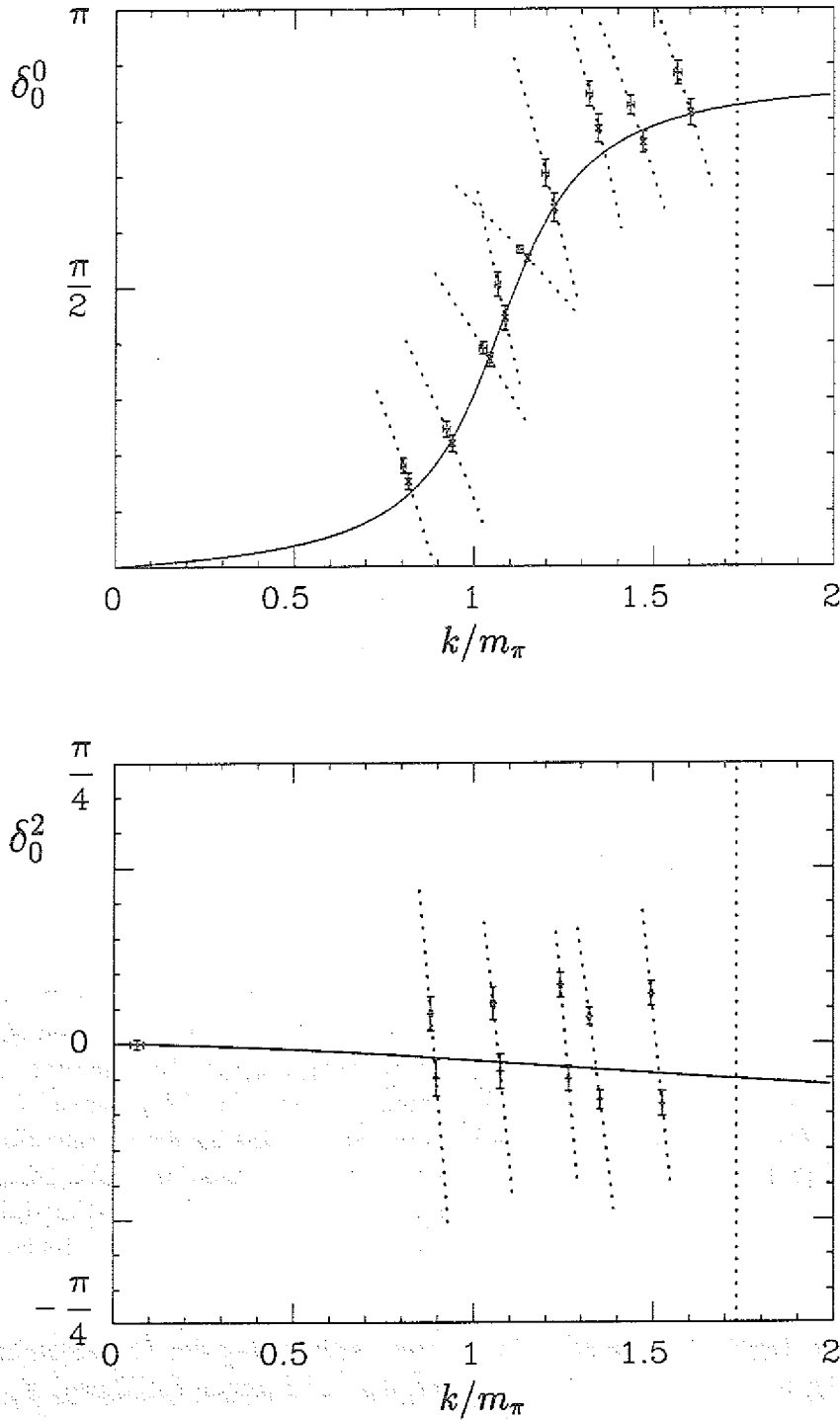


Abbildung 10.2: Die Streuphasen zum Isospin 0 und 2 im Vergleich bei Benutzung der Kontinuums- (obere Datenpunkte) oder der Gitterdispersionsrelation (untere Punkte). Die Streuphase im Isospin-0-Kanal wird sehr gut durch einen Fit mit dem störungstheoretischen Ansatz (8.32) beschrieben, und die Daten im Isospin-2-Kanal folgen dem störungstheoretisch auf der Grundlage dieser Ergebnisse vorhergesagten Verlauf (8.33) (durchgezogene Kurven). Bei dem hier gewählten Datenpunkt ($\kappa = 0.320$, $J = 0.02$) sind die Gittereffekte am größten.

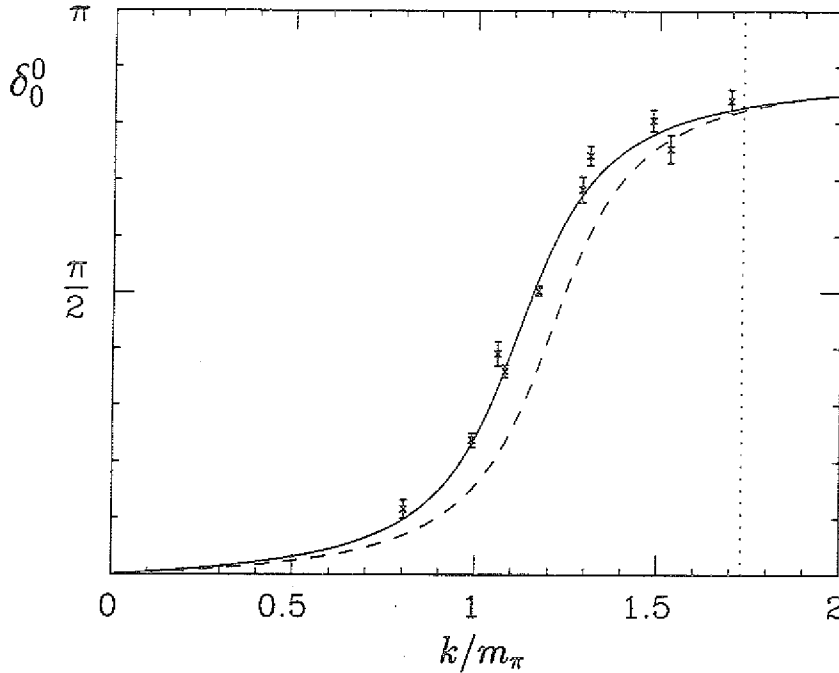


Abbildung 10.3: Vergleich des Fits mit dem störungstheoretischen Ansatz (8.32) für Isospin 0 mit dem Verlauf der Streuphase für die Schätzwerte $\tilde{m}_\sigma$ und $\tilde{g}_R$ aus Tabelle 9.2 am Beispiel der Daten für den Simulationspunkt ($\kappa=0.315$, $J=0.01$).

Im folgenden sollen unterschiedliche Methoden zur Bestimmung der Resonanzmasse m_σ und der Zerfallsbreite Γ_σ diskutiert werden:

1. Breit-Wigner-Fit (modellunabhängig):

Aus den Werten der Isospin-0-Streuphasen innerhalb des Resonanzbereiches ($\pi/4 \lesssim \delta_0^0 \lesssim 3\pi/4$) lassen sich durch einen Fit mit der (relativistischen) Breit-Wigner-Formel (8.31)

$$\tan\left(\delta_0^0 - \frac{\pi}{2}\right) = \frac{W^2 - m_\sigma^2}{m_\sigma \Gamma_\sigma} \quad (10.2)$$

die Resonanzmasse m_σ und ihre Breite Γ_σ berechnen. Dieser Ansatz hat den Vorteil, daß die Resonanzparameter m_σ und Γ_σ bestimmt werden können, ohne daß wir auf zusätzliche Modellannahmen zurückgreifen müssen. Dabei wirkt es sich kaum nachteilig auf die Ergebnisse aus (s. Tabelle 10.1), daß wir nur über wenige Datenpunkte innerhalb des Resonanzbereiches ($\pi/4 \lesssim \delta_0^0 \lesssim 3\pi/4$) verfügen¹.

2. Störungstheoretische Fits (modellabhängig):

Die Breit-Wigner-Formel (10.2) entspricht dem störungstheoretischen Resultat (8.32), in dem nur der singuläre Anteil δ_s^0 berücksichtigt wurde. Außerhalb

¹Die Verwendung der nichtrelativistischen Breit-Wigner-Formel (s.S. 129) ergibt fast identische Resultate.

des Resonanzbereiches muß auch der reguläre Anteil der Streuphasen δ_r^0 aus Gl. (8.32) berücksichtigt werden:

$$\begin{aligned}\delta_0^0 &= \delta_r^0 + \delta_s^0 \\ \text{mit:} \quad \tan \delta_s^0 &= g_R \frac{N-1}{48\pi} \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{m_\sigma^2 - W^2} \frac{k}{W} \\ \text{und:} \quad \delta_r^0 &= \frac{g_R}{96\pi} \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{kW} \ln \left(\frac{4k^2 + m_\sigma^2}{m_\sigma^2} \right) - g_R \frac{N-3}{48\pi} \frac{k}{W}.\end{aligned}\quad (10.3)$$

Tabelle 10.1 zeigt zunächst die Resultate aus einem 2-Parameter-Fit mit dem Ansatz (10.3) (bzw. (8.32)) zur Bestimmung der Resonanzmasse m_σ und der Kopplung g_R . Den störungstheoretischen Zusammenhang zwischen der Kopplung g_R und der Breite der σ -Resonanz stellt die folgende Beziehung her [105]:

$$\Gamma_\sigma = g_R \frac{N-1}{96\pi} \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{m_\sigma^2} \sqrt{m_\sigma^2 - 4m_\pi^2}. \quad (10.4)$$

Werden nicht nur die Ergebnisse für die Pionmasse m_π sondern auch die Werte für die Wellenfunktions-Renormierungskonstante Z sowie den Felderwartungswert Σ aus Tabelle 9.2 als bekannt vorausgesetzt, so kann derselbe Ansatz (10.3) für einen 1-Parameter-Fit zur Berechnung von m_σ benutzt werden, wenn für die Kopplung die Definition (9.6)

$$g_R = 3Z \frac{(m_\sigma^2 - m_\pi^2)}{\Sigma^2} \quad (10.5)$$

eingesetzt wird. Die Resultate der letztgenannten Methode dienen sowohl zur Darstellung der Kurven in den Abbildungen dieses Kapitels als auch als Grundlage für die störungstheoretische Berechnung des Energiespektrums im vorangegangenen Kapitel (s. Tabellen 9.5 bis 9.7).

Die Endergebnisse für die Resonanzmasse m_σ , die Zerfallsbreite Γ_σ und die Kopplung g_R sind für alle diskutierten Fit-Methoden in Tabelle 10.1 aufgeführt. Sofern die Kopplung g_R oder die Zerfallsbreite Γ_σ keine Fitparameter sind, werden sie gemäß der Formeln (10.5) bzw. (10.4) unter Berücksichtigung der entsprechenden Beziehungen für die Fehlerfortpflanzung aus den anderen Größen berechnet. Die Ergebnisse erweisen sich als außerordentlich stabil gegenüber der Variation des Fitansatzes: sei es des modellabhängigen oder des modellunabhängigen. Die Schwankungen betragen etwa zwei bis drei Standardabweichungen. Insgesamt stimmen die Werte für die Zerfallsbreite gut mit den störungstheoretischen Vorhersagen überein. Die Werte für die Resonanzmasse m_σ liegen jedoch systematisch (ca. 5 %) unterhalb der Schätzwerte $\bar{m}_\sigma$ aus dem Fit an den σ -Propagator im Impulsraum. Dies ist nicht weiter verwunderlich, da die Breite der σ -Resonanz für den untersuchten Parameterbereich relativ groß ist: $\Gamma_\sigma \approx 0.11\text{--}0.18 m_\sigma$.

	SIMULATIONSUNKTE		
	1	2	3
κ	0.310	0.315	0.320
J	0.005	0.010	0.020
Schätzwerte			
$\tilde{m}_\sigma$	0.538(1)	0.720(1)	0.906(2)
$\tilde{g}_R(\tilde{m}_\sigma, m_\pi, \Sigma, Z)$	22.0(1)	24.4(1)	27.0(1)
$\tilde{\Gamma}_\sigma(\tilde{m}_\sigma, m_\pi, \tilde{g}_R)$	0.074(1)	0.121(1)	0.165(1)
Breit-Wigner-Fit			
m_σ	0.520(1)	0.706(2)	0.885(2)
$g_R(m_\sigma, m_\pi, \Sigma, Z)$	20.3(1)	23.4(1)	25.8(2)
Γ_σ	0.079(4)	0.130(9)	0.160(17)

**Störungstheoretischer Fit
für m_σ und g_R**

m_σ	0.513(1)	0.688(2)	0.863(3)
g_R	21.1(8)	25.7(1.0)	28.1(1.4)
$\Gamma_\sigma(m_\sigma, m_\pi, g_R)$	0.064(3)	0.116(5)	0.156(8)

**Störungstheoretischer Fit
nur für m_σ**

m_σ	0.515(1)	0.691(1)	0.868(2)
$g_R(m_\sigma, m_\pi, \Sigma, Z)$	19.8(1)	22.3(1)	24.6(1)
$\Gamma_\sigma(m_\sigma, m_\pi, g_R)$	0.060(1)	0.102(1)	0.138(1)

Tabelle 10.1: Ergebnisse für die Resonanzmasse m_σ , die Kopplung g_R und die Zerfallsbreite Γ_σ des σ -Teilchens aus einem Fit mit der relativistischen Breit-Wigner-Formel (10.2) bzw. aus 1 und 2-Parameter-Fits mit dem störungstheoretischen Ansatz (8.32). Sofern die Kopplung g_R oder die Zerfallsbreite Γ_σ keine Fitparameter sind, werden sie gemäß der Formeln (10.5) bzw. (10.4) aus den anderen Größen berechnet. Zum Vergleich sind ebenfalls die Schätzwerte aus Tabelle 9.2 angegeben. – Die in Klammern angegebenen Zahlen sind rein statistische Fehler.

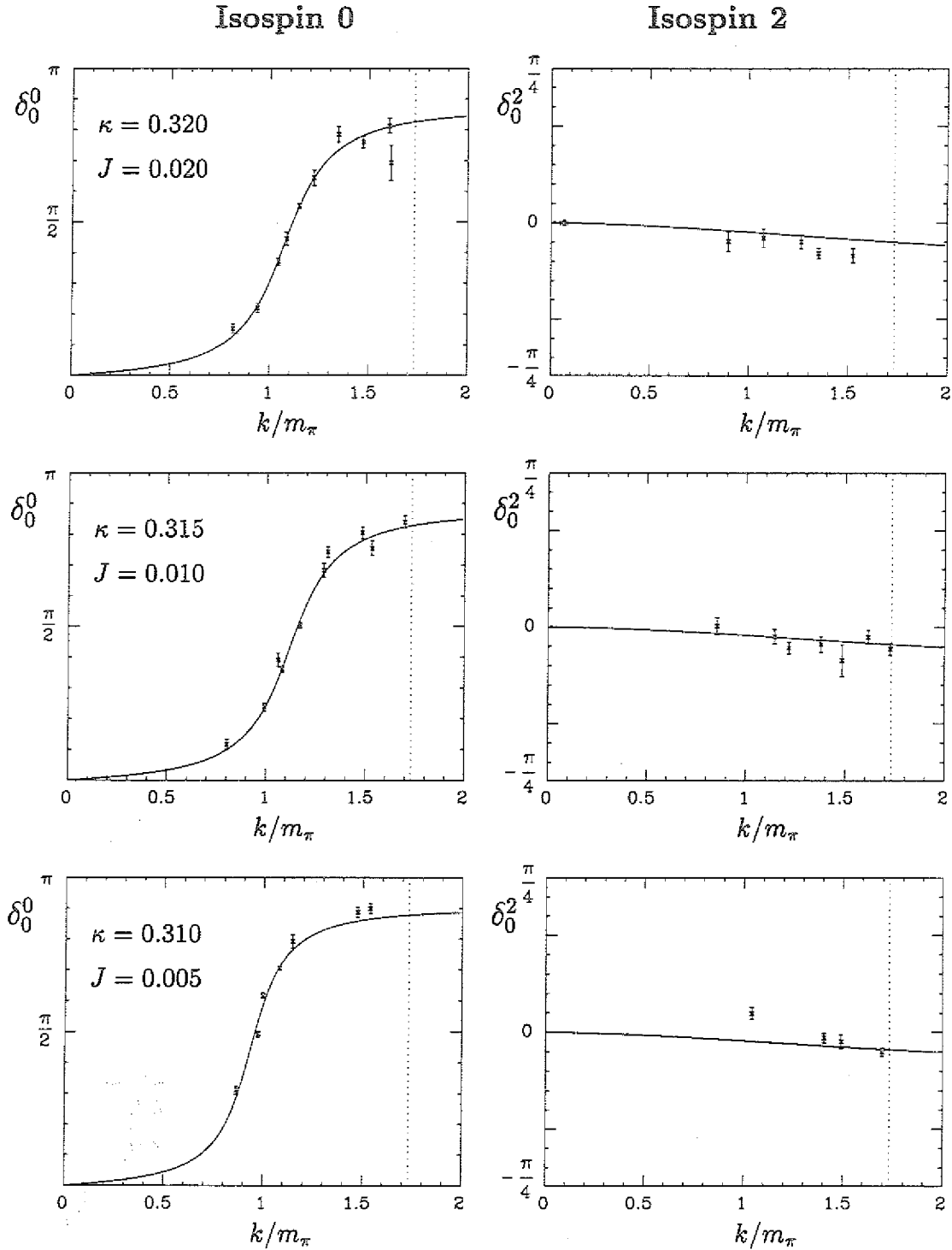


Abbildung 10.4: Alle Daten zu den Streuphasen auf einen Blick: links zum Isospin 0, rechts zum Isospin 2. Im Isospin-0-Kanal sind die Fits mit dem störungstheoretischen Ansatz (8.32) eingezeichnet, die die Daten sehr gut beschreiben. Die gemessenen Werte der Streuphasen im Isospin-2-Kanal werden durch die störungstheoretischen Vorhergesagen (8.33) (durchgezogene Kurven) auf der Grundlage dieser Ergebnisse sehr gut erklärt.

Es lassen sich folgende Schlußfolgerungen ziehen:

- Wie schon im ersten Teil dieser Arbeit, so zeigt sich auch hier, daß die Störungstheorie als Folge der Trivialität der 4dimensionalen Φ^4 -Theorie sehr gut anwendbar ist.
- Damit ist gleichzeitig die Anwendbarkeit des Lüscher'schen Verfahrens zur Untersuchung der Teilchenstreuung auf endlichen Gittern bewiesen.
- Außerdem erweist sich die naive Methode der Massenbestimmung über den Propagator im Impulsraum zumindest für relativ große Werte der Zerfallsbreite als unzureichend.

10.2 Zusammenfassung zum zweiten Teil

Nach einem Vorschlag von Lüscher können elastische Streuphasen in massiven Quantenfeldtheorien aus der Volumenabhängigkeit des Spektrums von 2-Teilchen-Zuständen berechnet werden. Im zweiten Teil dieser Arbeit wird die Anwendbarkeit dieser Methode am Beispiel der 4dimensionalen $O(4)$ - Φ^4 -Theorie mittels Monte-Carlo-Simulationen auf endlichen Gittern demonstriert. Dieses Verfahren zur Bestimmung der Streuphasen ermöglicht auch die Untersuchung instabiler Teilchen, in diesem Fall des σ -Teilchens. Es ist gelungen, die Masse m_σ und die Breite Γ_σ dieser σ -Resonanz auf diesem Weg zu messen.

Die erhaltenen Ergebnisse sind konsistent mit störungstheoretischen Rechnungen: Die Werte für die Zerfallsbreite stimmen sehr gut mit den Vorhersagen aus der Störungstheorie in der 1-Schleifen-Näherung überein. Erwartungsgemäß liegen die Werte der Resonanzmasse (für den untersuchten Parameterbereich ca. 5 %) unterhalb der Schätzwerte aus dem Fit an den σ -Propagator im Impulsraum. Damit ist die Anwendbarkeit des Lüscher'schen Verfahrens zur Untersuchung der Teilchenstreuung auf endlichen Gittern bewiesen.

Anhang A

Ergodizität und detailliertes Gleichgewicht

Es wird ein allgemeiner Beweis der Ergodizität und des detaillierten Gleichgewichts für Multi-Cluster-Methode¹ einschließlich der Berücksichtigung eines äußeren Stromes skizziert [61].

Ergodizität

Für zwei Felder $\vec{\Phi}(x)$, $\vec{\Phi}'(x)$ läßt sich stets eine Richtung $\vec{r}$ finden, so daß die Spins über eine Reflexion $R(\vec{r})$ auseinander hervorgehen können, d.h. $\forall \vec{\Phi}(x)$, $\vec{\Phi}'(x) \exists \vec{r} \in S^{N-1}$ mit $\vec{\Phi}'(x) = R(\vec{r})\vec{\Phi}(x)$. Dies impliziert aber wiederum, daß jede beliebige Konfiguration $\{\vec{\Phi}'\}$ aus jeder Konfiguration $\{\vec{\Phi}\}$ in höchstens L^d -Schritten erreichbar ist.

Beweis des detaillierten Gleichgewichts

Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Feldkonfigurationen $\bar{P}(\vec{\Phi} \rightarrow \vec{\Phi}')$ wird formal geschrieben als (vgl. [50, 62]):

$$\bar{P}(\vec{\Phi} \rightarrow \vec{\Phi}') = \sum_{R(\vec{r})} \sum_{\{c_i\}} K_R(\vec{\Phi}, \{c_i\}) \sum_{\mathbf{C}} W(\vec{\Phi}, \{c_i\} \rightarrow \mathbf{C}) \delta(\vec{\Phi}' - R^{\mathbf{C}}(\vec{r})\vec{\Phi}). \quad (\text{A.1})$$

Hierbei sind folgende Größen verwendet worden:

- Die Multi-Cluster-Struktur $\{c_i\}$ ($i \in I$) des Gitters besteht aus $|I|$ Clustern, wobei I die Indexmenge darstellt. Bei gegebener Clusterstruktur $\{c_i\}$ ist die Summe $\sum_{\mathbf{C}}$ – anders als bei der 1-Clustermethode – als die Summe über alle Indexteilmengen $J \subset I$ zu verstehen, mit denen aus den $|I|$ Clustern ein Multicluster $\mathbf{C} = \{c_j\}$, ($j \in J$) gebildet werden kann.

¹Der Beweis für die 1-Cluster-Methode ergibt sich bei $J = 0$ als Spezialfall für eine spezielle Wahl der Parameter

- Die Wahrscheinlichkeit $W(\vec{\Phi}, \{c_i\} \rightarrow \mathbf{C})$, aus einer bestimmten Clusterstruktur $\{c_i\}$ den Multiclustern $\mathbf{C} = \{c_j\}$ auszuwählen, hängt hier zusätzlich noch von der Feldkonfiguration ab. Ist $0 < w(\vec{\Phi}, c_i) < 1$ (beispielsweise $w(\vec{\Phi}, c_i) = 1/2$) die von der Feldkonfiguration abhängige Wahrscheinlichkeit, einen Einzel-Cluster c_j in den Multi-Cluster aufzunehmen, so ist

$$W(\vec{\Phi}, \{c_i\} \rightarrow \mathbf{C}) = \prod_{c_j \in \mathbf{C}} w(\vec{\Phi}, c_j) \prod_{c_i \notin \mathbf{C}} (1 - w(\vec{\Phi}, c_i)). \quad (\text{A.2})$$

Bei der 1-Clustermethode wird nur ein Cluster ausgewählt, und statt Gl. (A.2) steht hier die Summe über die einzelnen Cluster:

$$W(\phi, \{c_i\} \rightarrow \mathbf{C}) = \sum_{i \in I} \frac{|c_i|}{|\Lambda|} \delta_{c_i, \mathbf{C}}. \quad (\text{A.3})$$

Da die Wahl eines zufälligen Gitterpunktes größere Cluster bevorzugt, ist die Wahrscheinlichkeit $W(\phi, \mathbf{C})$ noch mit der relativen Größe des Clusters (Verhältnis der Anzahl der Punkte im Cluster $|c_i|$ zur Gesamtzahl der Gitterpunkte $|\Lambda|$) zu gewichten.

In beiden Fällen kann man zeigen, daß:

$$\sum_{\mathbf{C}} W(\vec{\Phi}, \{c_i\} \rightarrow \mathbf{C}) = 1. \quad (\text{A.4})$$

- Die Wahrscheinlichkeit $K_R(\vec{\Phi}, \{c_i\})$, aus der Spinkonfiguration $\{\vec{\Phi}\}$ eine bestimmte Clusterstruktur $\{c_i\}$ zu erhalten, ist durch die Bindungs-Wahrscheinlichkeiten (4.18) definiert:

$$K_R(\vec{\Phi}, \{c_i\}) = \prod_{\ell \in \{c_i\}} p_R(\vec{\Phi}, \ell) \prod_{\ell \in \{\partial c_i\}} (1 - p_R(\vec{\Phi}, \ell)). \quad (\text{A.5})$$

Durch die Auswahl eines Multi-Clusters $\mathbf{C}$ und einer Reflexion $R^{\mathbf{C}}(\vec{r})$ wird eine eindeutige Abbildung zweier Feldkonfigurationen aufeinander definiert. Bei der Diskussion der Bedingung (4.7) für das detaillierte Gleichgewicht sind die Abbildungen $\vec{\Phi}' = R^{\mathbf{C}}(\vec{r}) \vec{\Phi}$ und $\vec{\Phi} = R^{\mathbf{C}}(\vec{r}) \vec{\Phi}'$ gleich. Daher gilt:

$$\frac{\bar{P}(\vec{\Phi} \rightarrow \vec{\Phi}')}{\bar{P}(\vec{\Phi}' \rightarrow \vec{\Phi})} = \frac{\sum_{\{c_i\}=\mathbf{C}} K_R(\vec{\Phi}, \{c_i\}) \prod_{c_j \in \mathbf{C}} w(\vec{\Phi}, c_j) \prod_{c_i \notin \mathbf{C}} (1 - w(\vec{\Phi}, c_i))}{\sum_{\{c_i\}=\mathbf{C}} K_R(\vec{\Phi}', \{c_i\}) \prod_{c_j \in \mathbf{C}} w(\vec{\Phi}', c_j) \prod_{c_i \notin \mathbf{C}} (1 - w(\vec{\Phi}', c_i))} \quad (\text{A.6})$$

Des weiteren ist:

$$K_R(\vec{\Phi}', \{c_i\}) = \prod_{\ell \in \partial \mathbf{C}} \frac{(1 - p_R(\vec{\Phi}', \ell))}{(1 - p_R(\vec{\Phi}, \ell))} K_R(\vec{\Phi}, \{c_i\}) \quad (\text{A.7})$$

Nun werden zwei wichtige Forderungen an die Wahrscheinlichkeiten $w(\vec{\Phi}, c_j)$ gestellt, einen Einzel-Cluster c_j in den Multi-Cluster $\mathbf{C}$ aufzunehmen:

$$\prod_{c_j \in \mathbf{C}} w(\vec{\Phi}', c_j) = \mathcal{A}_{\mathbf{C}} \prod_{c_j \in \mathbf{C}} w(\vec{\Phi}, c_j) \quad (\text{A.8})$$

$$w(\vec{\Phi}', c_j) = w(\vec{\Phi}, c_j) \quad \text{für } c_i \notin \mathbf{C} \quad (\text{A.9})$$

Die Größe $\mathcal{A}_{\mathbf{C}}$ hängt nur von den Feldern $\vec{\Phi}(x)$ im Multicluster $\mathbf{C}$ ab, sei aber zunächst nicht weiter eingeschränkt.

Da alle Clusterstrukturen $\{c_i\}$ in $\sum_{\{c_i\}=\mathbf{C}}$ mit $\partial\mathbf{C}$ vereinbar sein müssen, darf das Produkt $\prod_{\ell \in \partial\mathbf{C}}$ vor die Summe gezogen werden. Damit ergibt sich folgende Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht:

$$\frac{\bar{P}(\vec{\Phi} \rightarrow \vec{\Phi}')}{\bar{P}(\vec{\Phi}' \rightarrow \vec{\Phi})} = \prod_{\ell \in \partial\mathbf{C}} \frac{(1 - p_R(\vec{\Phi}, \ell))}{(1 - p_R(\vec{\Phi}', \ell))} \mathcal{A}_{\mathbf{C}}^{-1}. \quad (\text{A.10})$$

Sei zunächst $\mathcal{A}_{\mathbf{C}} = 1$ gesetzt. Die Bindungen (*bonds*) ℓ zwischen nächsten und übernächsten Nachbarn werden unabhängig gesetzt, so daß für eine Bindung $\ell = \langle x, y \rangle$ an der Oberfläche $\partial\mathbf{C}$ des (reflektierten) Multi-Clusters

$$(\vec{\Phi}(x) \cdot \vec{r})(\vec{\Phi}(y) \cdot \vec{r}) = -(\vec{\Phi}'(x) \cdot \vec{r})(\vec{\Phi}'(y) \cdot \vec{r}), \quad \langle x, y \rangle \in \partial\mathbf{C} \quad (\text{A.11})$$

gilt ($y = x + n\hat{\mu}$, $n = 1, 2$ in dieser Arbeit). Mit Hilfe von $(\vec{r}^\alpha \vec{\Phi}^\alpha(x))(\vec{r}^\beta \vec{\Phi}^\beta(y)) = \frac{1}{2} \vec{\Phi}^\alpha(x)(1 - R(\vec{r})) \vec{\Phi}^\alpha(y)$ und der Ausdehnung auf das ganze Gitter $\bar{\Gamma}$, erhält man schließlich:

$$\frac{\bar{P}(\vec{\Phi} \rightarrow \vec{\Phi}')}{\bar{P}(\vec{\Phi}' \rightarrow \vec{\Phi})} = \prod_{\langle xy \rangle \in \bar{\Lambda}} \exp \left(-2\kappa_{x,y} \left(\vec{\Phi}(x) \cdot \vec{\Phi}(y) - \vec{\Phi}'(x) \cdot \vec{\Phi}'(y) \right) \right), \quad (\text{A.12})$$

wobei $\kappa_{x,x+\hat{\mu}} = \kappa$ und $\kappa_{x,x+2\hat{\mu}} = \kappa\omega$ ist. Da im Exponenten die Differenz der Wirkungen $S\{\vec{\Phi}, \kappa, \omega\}$ und $S\{\vec{\Phi}', \kappa, \omega\}$ steht, ist der Beweis des detaillierten Gleichgewichts für die Standard- und die verbesserte Wirkung ohne äußere Quelle abgeschlossen.

Mit endlicher äußerer Quelle erwarten einen zusätzlichen Differenz-Term proportional zum äußeren Strom J in der folgenden Art:

$$\mathcal{A}_{\mathbf{C}} = \prod_{c_i \in \mathbf{C}} \exp \left(2Jr_N \sum_{x \in c_i} (\vec{r} \cdot \vec{\Phi}(x)) \right). \quad (\text{A.13})$$

Aus den Bedingungen (A.9) ergibt sich dann folgende Wahrscheinlichkeit $w(\vec{\Phi}, c_j)$, einen Einzel-Cluster c_j in den Multi-Cluster $\mathbf{C}$ aufzunehmen:

$$w(\vec{\Phi}, c_j) = \left(1 + \exp \left(2Jr_N \sum_{x \in c_j} (\vec{r} \cdot \vec{\Phi}(x)) \right) \right)^{-1}. \quad (\text{A.14})$$

für den verallgemeinerten Fall mit äußerer Quelle J . Im Grenzfall $J = 0$ bekommen wir, wie gehabt $w(\vec{\Phi}, c_j) = \frac{1}{2}$, d.h. jeder zweite Cluster wird reflektiert bzw. nicht reflektiert.

Anhang B

Sattelpunktentwicklung

In diesem Anhang möchte ich die Sattelpunktentwicklung des Integrals

$$I = \int_0^{\infty} dM F(M) \exp(-V\mathcal{U}(M)), \quad (\text{B.1})$$

die in Abschnitt 5.3.3 benötigt wird, ausführlicher besprechen. $\mathcal{U}(M)$ soll eine reelle Funktion von M sein, die ein eindeutiges Minimum bei M_0 hat. Näheres zur Sattelpunktentwicklung findet man z.B. bei Dingle [115].

Wir betrachten die Taylor-Entwicklung der Funktion $\mathcal{U}(M)$ in der Umgebung des Minimums M_0 und definieren eine neue Integrationsvariable $z(M)$ durch

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}z^2 = \mathcal{U}(M) - \mathcal{U}(M_0) &= \frac{1}{2}(M - M_0)^2 \mathcal{U}''(M_0) + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} (M - M_0)^n \mathcal{U}^{(n)}(M_0), \\ \mathcal{U}'(M_0) = 0 \quad , \quad \mathcal{U}''(M_0) &> 0. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Durch die Substitution $M \rightarrow z$ nimmt das Integral I Gauß-Gestalt an

$$I = \exp(-V\mathcal{U}(M_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left(-\frac{V}{2}z^2\right) \frac{F(M)}{(dz/dM)}. \quad (\text{B.3})$$

Dabei wird angenommen, daß z entlang des Weges durch den stationären Punkt $z=0$ reell ist. Als nächstes müssen $F(M)$ und (dz/dM) als Funktionen von z ausgedrückt werden.

Da für M in der Nähe des Minimums $M \rightarrow M_0$: $z \sim (M - M_0)$ ist, kann $(M - M_0)$ in einer Potenzreihe von z entwickelt werden. Benutzen wir das Lagrangesche Umkehr-Theorem [115], so erhalten wir:

$$M = M_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k z^k = M_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{d}{dM} \right)^{k-1} \left(\frac{M - M_0}{z(M)} \right)^k \Big|_{M=M_0} \frac{z^k}{k!}. \quad (\text{B.4})$$

Die ersten Terme dieser Entwicklung für $M(z)$ sind noch sehr einfach zu berechnen:

$$\begin{aligned} a_1 &= (\mathcal{U}''(M_0))^{-1/2}, \\ a_2 &= -\frac{1}{6} \frac{\mathcal{U}^{(3)}(M_0)}{(\mathcal{U}''(M_0))^2}, \\ a_3 &= \frac{5}{72} \frac{(\mathcal{U}^{(3)}(M_0))^2}{(\mathcal{U}''(M_0))^{7/2}} - \frac{1}{24} \frac{\mathcal{U}^{(4)}(M_0)}{(\mathcal{U}''(M_0))^{5/2}}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Nun muß lediglich eine explizite Funktion $F(M)$ gewählt werden, um die Koeffizienten b_l der Potenzreihen-Entwicklung von $F(M)(dM/dz)$ in z zu bestimmen:

$$\frac{dM}{dz} F(M) = \left(\sum_{k=1}^{\infty} k a_k z^{k-1} \right) F(M) \Big|_{M=M_0+\sum_{k=1}^{\infty} a_k z^k} = \sum_{l=0}^{\infty} b_l z^l. \quad (\text{B.6})$$

Mit einer einfachen Gaußschen Integration kann schließlich die Sattelpunktentwicklung des Integrals I berechnet werden

$$\begin{aligned} I &= \exp(-V\mathcal{U}(M_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left(-\frac{V}{2}z^2\right) \sum_{l=0}^{\infty} b_l z^l \\ &= \exp(-V\mathcal{U}(M_0)) \sum_{l=0}^{\infty} b_{2l} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+l\right)}{V^{\frac{1}{2}+l}} 2^{\frac{1}{2}+l} z^l. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Nur b_l mit einem geraden Index tragen zur Entwicklung bei. In der niedrigsten Ordnung ergibt sich

$$I = \exp(-V\mathcal{U}(M_0)) \sqrt{\frac{2\pi}{V\mathcal{U}''(M_0)}} F(M_0). \quad (\text{B.8})$$

Anhang C

Volumenkorrekturen

In diesem Anhang will ich mich ausführlich der Diskussion der Funktionen $\bar{g}_r(mL)$ widmen, die in den Volumenkorrekturen von Abschnitt 5.3.5 in der Kontinuumsversion auftreten. Insbesondere möchte ich auf die Einflüsse einer endlichen Gitterkonstanten eingehen. Außerdem werden die Modifikationen der Formeln durch eine andere Gittergeometrie $V = L^d = L_1 \cdots L_d$ diskutiert – beispielsweise die zylindrische mit unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Gitterausdehnungen.

C.1 Eigenschaften der Funktionen $\bar{g}_r(mL)$

Zunächst wird eine eindimensionale Integraldarstellung für die Volumenkorrekturen $\bar{g}_r(mL)$

$$\begin{aligned}\bar{g}_r(mL) &= \Gamma(r) L^{d-2r} \left\{ \bar{G}_r(m^2) - G_r^\infty(m^2) \right\} \\ &= \Gamma(r) L^{d-2r} \left\{ \frac{1}{L^d} \sum'_{p \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^d} (p^2 + m^2)^{-r} - \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} (p^2 + m^2)^{-r} \right\} \\ &= \Gamma(r) \left\{ \sum'_{n \in (2\pi\mathbb{Z})^d} (n^2 + y^2)^{-r} - \int \frac{d^d z}{(2\pi)^d} (z^2 + y^2)^{-r} \right\}_{y=mL}, \quad (\text{C.1})\end{aligned}$$

angegeben, die in den störungstheoretischen Entwicklungen von Abschnitt 5.3 für $d = 4$ auftreten. Für $r = 0$ ist zunächst formal im Integranden der Logarithmus einzusetzen.

Die auf diese Weise definierte Funktion $\bar{g}_r$ steht in engem Zusammenhang mit dem bei Hasenfratz und Leutwyler [77] definierten g_r :

$$\begin{aligned}g_r &= L^{2r-d} (\bar{g}_r(mL) + \Gamma(r)(mL)^{-2r}), \quad (r \neq 0), \\ g_0 &= L^{-d} (\bar{g}_0(mL) + \ln(mL)^2).\end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Unsere Konvention besitzt allerdings den Vorteil, daß $\bar{g}_r(mL)$ eine Funktion der dimensionslosen Größe mL ist und ansonsten nur von der Geometrie des Raumes, d.h. den Verhältnissen $L_1 : \cdots : L_d$ abhängt.

Um die notwendigen Umformungen möglichst komprimiert darzustellen, werde ich kurz die wichtigsten verwendeten Hilfsmittel auflisten:

- Die Poissonsche Summationsformel verknüpft Summen auf zueinander dualen Gittern:

$$L^{-d} \sum_{p \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^d} F(p) = \sum_{x \in (L\mathbb{Z})^d} \tilde{F}(x). \quad (\text{C.3})$$

Dabei ist $\tilde{F}(x)$ die Fourier-Transformierte von $F(p)$

$$\tilde{F}(x) = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{ipx} F(p). \quad (\text{C.4})$$

Sie wird häufig benutzt, um eine weniger konvergente Reihenentwicklung in eine konvergentere Reihe umzuformen.

- Die Summe

$$\theta(\tau) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} e^{-\pi \tau n^2} \quad (\text{C.5})$$

ist ein Spezialfall der sogenannten θ -Funktion – mit der ich im Rahmen meiner Diplomarbeit ausgiebig zu tun gehabt habe. Unter der speziellen modularen Transformation $\tau \rightarrow 1/\tau$ verhält sie sich in der folgenden Weise:

$$\theta(\tau) = \left(\frac{1}{\sqrt{\tau}}\right)^d \theta\left(\frac{1}{\tau}\right). \quad (\text{C.6})$$

Dies kann unter Benutzung der Poissonschen Summationsformel gezeigt werden.

- Bei Berücksichtigung der Gittergeometrie $V = L^d = L_1 \cdots L_d$ mit unterschiedlichen Ausdehnungen in die einzelnen Richtungen definiert man

$$l_\mu = \frac{L_\mu}{L}, \quad \text{so daß} \quad \prod_{\mu=1}^d l_\mu = 1. \quad (\text{C.7})$$

Die θ -Funktion

$$\theta(\tau, l_\mu) = \prod_{\mu=1}^d \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-\pi l_\mu \tau n^2} \quad (\text{C.8})$$

hängt dann implizit von den Parametern $l_\mu \tau$ ab und verhält sich dementsprechend unter modularen Transformationen:

$$\theta(\tau, l_\mu) = \left(\frac{1}{\sqrt{\tau}}\right)^d \theta\left(\frac{1}{\tau}, \frac{1}{l_\mu}\right). \quad (\text{C.9})$$

- Später werden wir auch die Fourier-Transformation

$$\int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{ipx} \exp\left(-\frac{1}{2} p^T B p\right) = [2\pi \det B]^{-d/2} \exp\left(-\frac{1}{2} x^T B^{-1} x\right) \quad (\text{C.10})$$

benutzen. Hierbei ist B eine symmetrische, positiv definite Matrix. Des weiteren benötigen wir die einfache Laplace-Transformation

$$\frac{1}{(p^2 + m^2)^r} = \int_0^\infty d\lambda \frac{\lambda^{r-1}}{\Gamma(r)} \exp \left\{ -\lambda (p^2 + m^2) \right\} \quad (\operatorname{Re}(p^2 + m^2) > 0). \quad (\text{C.11})$$

Wenden wir nun die Poissonsche Summationsformel (C.3) für $F(p) = (p^2 + m^2)^{-r}$ an: Zunächst erhalten wir mit Hilfe der Laplace-Transformation (C.11) für die Fourier-Transformierte von $F(p)$:

$$\tilde{F}(x) = \int_0^\infty d\lambda \frac{\lambda^{r-1}}{\Gamma(r)} e^{-\lambda m^2} \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{ipx} e^{-\lambda p^2}. \quad (\text{C.12})$$

(Die Integrationen vertauschen, da der $\operatorname{Re}(p^2 + m^2)$ wohldefiniert ist und der Integrand am Rand der Integrationsgrenzen $\lambda \rightarrow 0, \infty$ abfällt.) Wird die Fourier-Transformation mit Hilfe von Gl. (C.10) ausgewertet, so erhalten wir (vgl. Gl. (C.3))

$$\frac{1}{L^d} \sum_{p \in (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z})^d} (p^2 + m^2)^{-r} = \sum_{x \in (L\mathbb{Z})^d} \int_0^\infty d\lambda \frac{\lambda^{r-1}}{\Gamma(r)} (4\pi\lambda)^{-d/2} \exp \left(-\lambda m^2 - \frac{x^2}{4\lambda} \right). \quad (\text{C.13})$$

Um eine mögliche Divergenz bei $\lambda=0$ zu vermeiden, müssen wir den Summand mit $x=0$ separat behandeln:

$$\begin{aligned} \frac{1}{L^d} \sum_{p \in (\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z})^d} (p^2 + m^2)^{-r} &= \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} (p^2 + m^2)^{-r} \\ &+ \int_0^\infty d\lambda \frac{\lambda^{r-1}}{\Gamma(r)} (4\pi\lambda)^{-d/2} e^{-\lambda m^2} \sum'_{x \in (L\mathbb{Z})^d} \exp \left(-\frac{x^2}{4\lambda} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Nach Multiplikation von Gl. (C.14) mit $\Gamma(r)L^{d-2r}$, und Vergleich mit der Definition (C.1) erhalten wir die folgende Integraldarstellung für die Volumenkorrekturen:

$$\bar{g}_r(mL) = \int_0^\infty d\tau \tau^{r-1} (4\pi\tau)^{-d/2} e^{-\tau(mL)^2} \sum'_{n \in \mathbb{Z}^d} \exp \left(-\frac{n^2}{4\tau} \right) - \frac{\Gamma(r)}{(mL)^{2r}}. \quad (\text{C.15})$$

Die Funktionen $\bar{g}_r(mL)$ können auf diese Weise für beliebige r fortgesetzt werden, wenn wir $\bar{g}_0$ in folgender Weise definieren:

$$\bar{g}_0(mL) = \int_0^\infty d\tau \tau^{-1} (4\pi\tau)^{-d/2} e^{-\tau(mL)^2} \sum'_{n \in \mathbb{Z}^d} \exp \left(-\frac{n^2}{4\tau} \right) - \ln(mL)^2. \quad (\text{C.16})$$

Außerdem können wir folgende Rekursionsgleichung ablesen:

$$\bar{g}_{r+1}(mL) = -\frac{d}{d(mL)^2} \bar{g}_r(mL) \quad (\text{C.17})$$

Das Integral in Gl. (C.15) muß zur numerischen Berechnung weiter aufbereitet werden. Berücksichtigt man zusätzlich die Variationen in der Gittergeometrie, die sich hier nur auf die auf die Funktion $\theta(\tau)$ (C.8) auswirken, so kann das Integral in drei Anteile aufgeteilt werden¹ [77]:

$$\bar{g}_r(mL) = (4\pi)^{-r} \left(a_r(x) + b_r(x) - b_{r-d/2}(x) - x^{-r} \Gamma(r) \right)_{x=\frac{(mL)^2}{4\pi}}. \quad (\text{C.18})$$

Die Funktion $b_s(x)$ kann durch die unvollständige Γ -Funktion ausgedrückt werden:

$$b_s(x) = x^{-s} \Gamma(s, x) = x^{-s} \int_x^\infty d\lambda \lambda^{s-1} e^{-\lambda x}. \quad (\text{C.19})$$

und $a_s(x)$ hat eine konvergente Integraldarstellung

$$a_s(x) = \int_0^1 d\tau \left\{ \tau^{s-1-d/2} e^{-\tau x} \left(\theta\left(\frac{1}{\tau}, l_\mu\right) - 1 \right) + \tau^{-s-1} e^{-x/\tau} \left(\theta\left(\frac{1}{\tau}, \frac{1}{l_\mu}\right) - 1 \right) \right\}, \quad (\text{C.20})$$

die numerisch z.B. mit Hilfe der Chebyshev-Integration ausgewertet werden kann [122]. Für die im ersten Teil der Arbeit simulierten hyperkubischen Gitter ist $l_1 = \dots = l_d = 1$.

Die Infrarot-Divergenzen (s. Anhang B von [77]) stecken in der unvollständigen Γ -Funktion in b_s . Im Gegensatz zu [77] wird in unserer Definition der Pol $\sim x^{-2r}$ kompensiert. Allerdings tritt hier ebenfalls definitionsbedingt für $r > d/2$ eine Singularität in $b_{r-d/2}$ auf, die von dem Anteil $G_r^\infty(m^2)$ im unendlichen Volumen stammt. In den Anwendungen – vergl. Definition der Funktion B_3 (5.84) – wird dieser divergente Anteil letztendlich auch subtrahiert.

Reihenentwicklung der Funktionen $a_s(x)$ und $b_s(x)$

Die Singularitäten bei $x=0$ veranschaulichen die entsprechenden Reihenentwicklungen, mit denen die Funktion $b_s(x)$ (C.19) numerisch implementiert werden kann:

$$\begin{aligned} b_s(x) &= x^{-s} \Gamma(s) - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-x)^k \frac{1}{s+k} & (x \lesssim 1), \\ b_s(x) &= \frac{e^{-x}}{x} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{x^m} \frac{\Gamma(1-s+m)}{\Gamma(1-s)} & (x \gtrsim 1), \\ b_{-n}(x) &= \frac{(-x)^n}{n!} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln x - C \right) + \sum_{k \neq n}^{\infty} \frac{(-x)^k}{(n-k)k!} & (s = -n, n \in \mathbb{N}). \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

$C = 0.577215664901532\dots$ ist die Euler Konstante. Sehr gut implementierbar ist numerisch auch die Kettenbruch-Entwicklung [122]:

$$b_s(x) = e^{-x} x^s \frac{1}{x+} \frac{(1-s)}{1+} \frac{1}{x+} \frac{(2-s)}{1+} \frac{2}{x+} \frac{(3-s)}{1+} \frac{3}{x+\dots} \quad (\text{C.22})$$

¹Für $r=0$ ist statt des letzten Termes wieder $\ln(mL)^2$ abzuziehen

Außerdem gilt die Rekursionsformel

$$b_{s+1}(x) = \frac{s}{x} b_s(x) + \frac{e^{-x}}{x} \quad \text{und} \quad b_1(x) = \frac{e^{-x}}{x}. \quad (\text{C.23})$$

Die Funktion $a_s(x)$ (C.20) kann für kleine Argumente ebenfalls in einer Reihe entwickelt werden:

$$a_s(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_{s+n} \frac{(-x)^n}{n!} \quad (\text{C.24})$$

Der Einfluß Gittergeometrie schlägt sich in den Koeffizienten α_s nieder:

$$\alpha_s = \hat{\alpha}_{s-d/2}(l_\mu) + \hat{\alpha}_{-s}(1/l_\mu), \quad (\text{C.25})$$

$$\hat{\alpha}_s(l_\mu) = \int_0^1 d\tau \tau^{s-1} \left(\theta\left(\frac{1}{\tau}, l_\mu\right) - 1 \right), \quad (\text{C.26})$$

die durch numerische Integration ermittelt werden können.

Reihenentwicklung der Funktion $\bar{g}_r(y)$

Mit den beiden Entwicklungen (C.24) und (C.21) läßt sich folgende polynomiale Entwicklung der Volumenkorrekturen $\bar{g}_r(y)$ für beliebige Dimensionen und Gittergeometrien angeben:

$$\begin{aligned} \bar{g}_r(y) &= \frac{(-1)^r y^{d-2r}}{(-4\pi)^{d/2} (d/2 - r)!} \left(\ln y^2 - \frac{2}{d} + \sum_{k=d/2-r+1}^{d/2} \frac{1}{k} \right) \\ &\quad + (-1)^r \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^{2n}}{n!} \beta_{r+n} \quad (d/2 - r \in \mathbb{N}), \\ \bar{g}_r(y) &= \frac{-y^{d-2r} \Gamma(r - d/2)}{(4\pi)^{d/2}} + (-1)^r \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^{2n}}{n!} \beta_{r+n} \quad (d/2 - r \notin \mathbb{N}). \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

Zwischen den Entwicklungskoeffizienten β_s , die in Tabelle C.1 für ein hyperkubisches Gitter in $d=3$ bzw. $d=4$ Dimensionen tabelliert sind, und den Koeffizienten α_s (C.26) besteht folgender Zusammenhang:

$$\beta_s = \left(-\frac{1}{4\pi} \right)^s \left(\alpha_s + \frac{d/2}{s(s - d/2)} \right)$$

außer: $\beta_0 = \alpha_0 + \ln 4\pi - C - \frac{2}{d}$ (C.28)

$$\text{und} \quad \beta_{d/2} = \left(-\frac{1}{4\pi} \right)^{d/2} \left(\alpha_{d/2} - \ln 4\pi + C - \sum_{k=1}^{d/2} \frac{1}{k} \right) \quad \text{für } \frac{d}{2} \in \mathbb{N}.$$

Diese alternierende Reihe (C.27) stellt für kleine Argumente $y = mL$ eine sehr schnelle numerische Berechnung der Volumenkorrekturen in der Analyse sicher. Sie bricht

	$d=3$	$d=4$
β_0	1.453846306	1.701215478
β_1	0.225784994	0.140460997
β_2	0.010607534	- 0.020304776
β_3	- 0.000273105	- 0.000482043
β_4	$1.715678 \cdot 10^{-5}$	$2.530728 \cdot 10^{-5}$
β_5	- $1.608282 \cdot 10^{-6}$	- $2.238252 \cdot 10^{-6}$
β_6	$1.965921 \cdot 10^{-7}$	$2.672424 \cdot 10^{-7}$
β_7	- $2.937758 \cdot 10^{-8}$	- $3.952555 \cdot 10^{-8}$
β_8	$5.166360 \cdot 10^{-9}$	$6.918240 \cdot 10^{-9}$
β_9	- $1.042704 \cdot 10^{-9}$	- $1.393177 \cdot 10^{-9}$
β_{10}	$2.372337 \cdot 10^{-10}$	$3.166349 \cdot 10^{-10}$
β_{11}	- $6.003250 \cdot 10^{-11}$	- $8.008363 \cdot 10^{-11}$
β_{12}	$1.671881 \cdot 10^{-11}$	$2.229730 \cdot 10^{-11}$
β_{13}	- $5.080658 \cdot 10^{-12}$	- $6.775049 \cdot 10^{-12}$
β_{14}	$1.672819 \cdot 10^{-12}$	$2.230563 \cdot 10^{-12}$
β_{15}	- $5.931766 \cdot 10^{-13}$	- $7.909264 \cdot 10^{-13}$

Tabelle C.1: Werte der Entwicklungskoeffizienten β_i , die in den Volumenkorrekturen auftreten, für eine hyperkubische Box ($L_1 = \dots = L_d$) in $d = 3$ und $d = 4$ Dimensionen. Mit diesen (im Vorzeichen alternierenden) Größen ist die asymptotische Approximation (C.27) der Funktionen $\bar{g}_r(y)$ bis ca. $y=3$ möglich.

allerdings bei größeren Argumenten zusammen. Bei der Analyse, die für ca. 100 κ -Werte die Fits an $\langle \mathcal{M} \rangle_{j=0}$ und χ ca. 100 Mal in sehr kurzer Rechenzeit iterieren können muß, sind die Funktionen $B_r(y)$ deshalb direkt durch ein Chebyshev-Polynom approximiert worden [122].

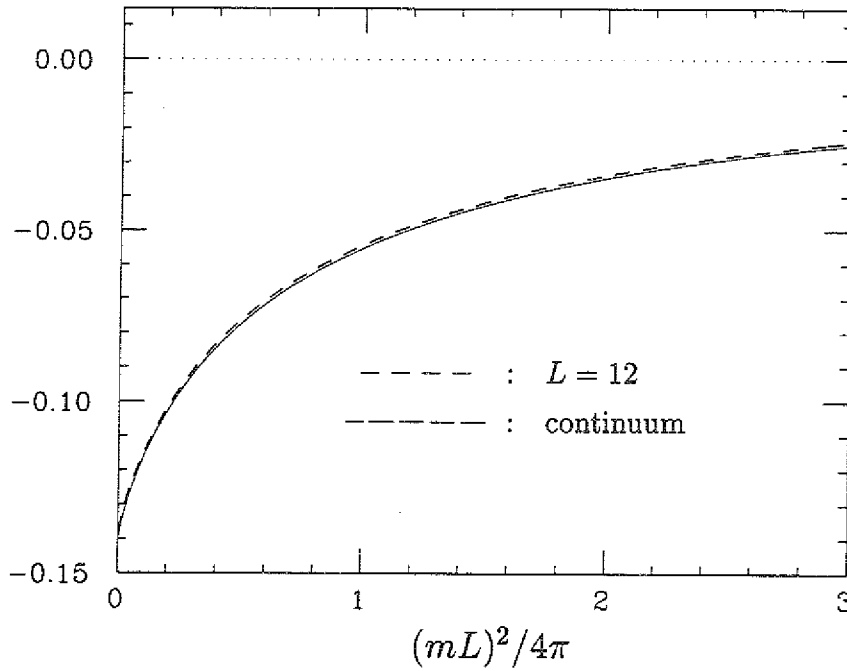
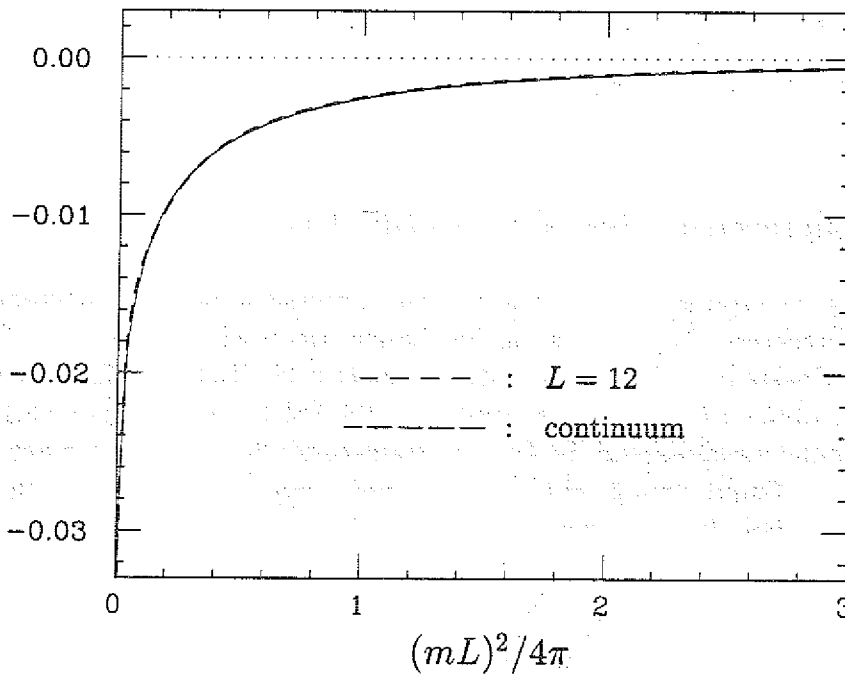
$\bar{g}_1(mL)$  $\bar{g}_2(mL)$ 

Abbildung C.1: Die Funktionen $\bar{g}_1(mL)$ und $\bar{g}_2(mL)$, die in Gl. (5.85) definiert werden, sind als durchgezogene Linien dargestellt. Die gestrichelten Kurven beschreiben die Modifikationen dieser Funktionen durch die endliche Gitterkonstante für die Standardwirkung und eine Gitterausdehnung $L = 12$.

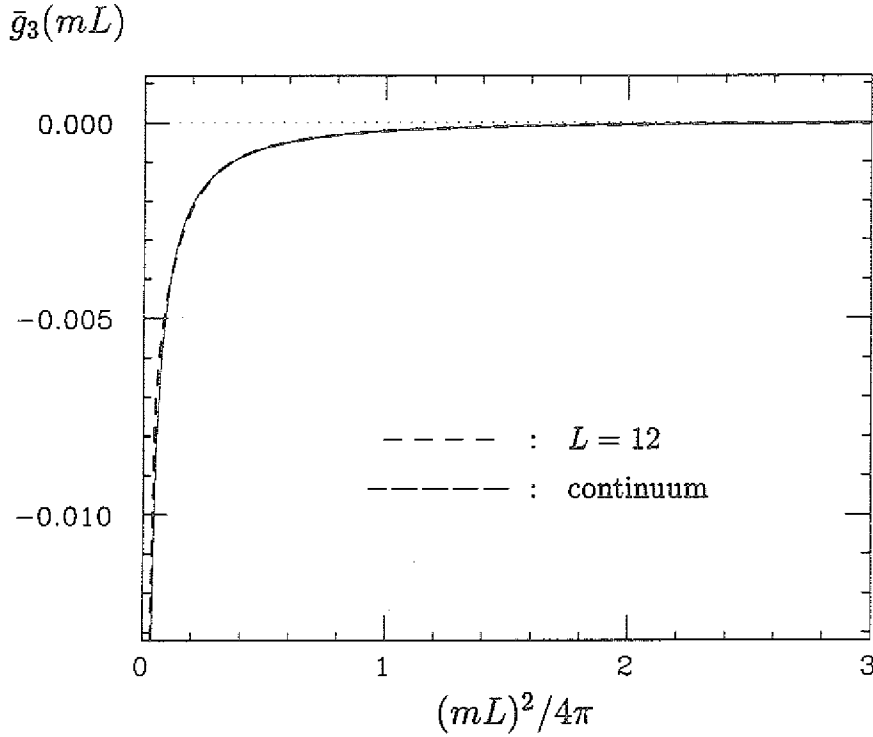


Abbildung C.2: Die Funktion $\bar{g}_3(mL)$ wie sie in Gl. (5.85) definiert wird, ist als durchgezogene Linien dargestellt. Die gestrichelte Kurve beschreibt die Modifikationen durch die endliche Gitterkonstante für $L = 12$.

C.2 Diskussion der Gittereffekte

Das Diagramm D veranschaulicht, wie wir zur Untersuchung der Gittereffekte für die Volumenkorrekturen $\bar{g}_r(mL)$ vorzugehen haben, wenn wir die Standard-Wirkung voraussetzen. Unsere periodische Box wird zu einem periodischen Gitter der Ausdehnung $L = L/a$, wobei a die Gitterkonstante ist. Die Ableitungen werden zu Differenzenquotienten und entsprechend die Fourier-transformierten Funktionen der Impulse $\tilde{f}(p)$ zu $\tilde{f}(\hat{p})$. Die Funktionen $\bar{g}_r(mL)$ gehen dementsprechend in Funktionen $\hat{g}_r^L(mL)$ über, die explizit von der Gitterausdehnung L abhängen:

$$\begin{aligned}
 \hat{g}_r^L(mL) &= \Gamma(r) L^{d-2r} \left\{ \frac{1}{L^d} \sum'_{p \in (\frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}_L)^d} (\hat{p}^2 + m^2)^{-r} - \int_{\mathcal{B}} \frac{d^d p}{(2\pi)^d} (\hat{p}^2 + m^2)^{-r} \right\} \\
 &= \Gamma(r) \left\{ \sum'_{n \in (2\pi \mathbb{Z}_L)^d} \left(\sum_{\mu=1}^d \left(2L \sin \frac{n_\mu}{2L} \right)^2 + y^2 \right)^{-r} \right. \\
 &\quad \left. - \int_{\mathcal{B}} \frac{d^d z}{(2\pi)^d} \left(\sum_{\mu=1}^d \left(2L \sin \frac{z_\mu}{2L} \right)^2 + y^2 \right)^{-r} \right\}_{y=mL}.
 \end{aligned} \tag{C.29}$$

Dabei sind der Gitterimpuls $\hat{p}_\mu = (2/a) \sin(p_\mu a/2)$ (s. Gl. (3.18)) und die Brillouin-Zonen $\mathcal{B} = (-\pi/a, \pi/a]$ und $\tilde{\mathcal{B}} = (-\pi\mathbb{L}, \pi\mathbb{L}]$ verwendet worden.

Die endliche Gittersumme im ersten Term kann für jede Gittergröße $\mathbb{L}$ numerisch ausgewertet werden. Da mehrere Impulse p zu einem $\hat{p}^2$ existieren kann die Berechnung selbstverständlich erheblich beschleunigt werden, wenn man zunächst die endliche Menge $\{w_i | w_i = \hat{p}^2, p \in ((2\pi/L)\mathbb{Z}_{\mathbb{L}})^d\}$ der unterschiedlichen Werte von $\hat{p}^2$ und deren Vielfachheiten $\sum_p \delta(w_i - \hat{p}^2)$ feststellt. Anschließend braucht nur noch über die kleine Menge unterschiedlicher w_i summiert zu werden.

Der zweite Term $\Gamma(r)\mathbb{L}^{d-2r} J_r(mL/\mathbb{L})$, mit

$$J_r(ma) = \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\hat{q}^2 + (ma)^2)^{-r}, \quad (\text{C.30})$$

läßt sich mit Hilfe einer Laplace Transformation der Art (C.11) wieder auf ein ein-dimensionales Integral zurückführen (s. z.B. [30]):

$$\begin{aligned} \Gamma(r)J_r(ma) &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int_0^{\infty} d\tau \tau^{r-1} e^{-\tau((ma)^2 + 2d-2\sum_{\mu} \cos q_{\mu})} \\ &= \int_0^{\infty} d\tau \tau^{r-1} e^{-\tau(ma)^2} \prod_{\mu=1}^d \left(e^{-2\tau} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} e^{2\tau \cos q} \right) \\ &= \int_0^{\infty} d\tau \tau^{r-1} e^{-\tau(ma)^2} \left(e^{-2\tau} I_0(2\tau) \right)^d. \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

Für die numerische Auswertung des Integrals (z.B. mit Chebyshev Integration [122]) benötigt man eine Entwicklung der hier eingeführte Besselfunktion

$$I_0(2\tau) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} e^{2\tau \cos q} \quad (\text{C.32})$$

für kleine bzw. große Argumente 2τ :

$$\begin{aligned} e^{-2\tau} I_0(2\tau) &= (\pi\tau)^{-1/2} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{2\tau} \right)^k \frac{((2k-1)!!)^2}{k! 2^{3k}} \right] \quad (\tau \rightarrow \infty). \\ e^{-2\tau} I_0(2\tau) &= e^{-2\tau} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\tau^{2k}}{(k!)^2} \quad (\tau \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

Damit kann der Einfluß einer endlichen Gitterkonstante auf die Funktionen $\bar{g}_r(mL)$ berechnet werden. In den Abbildungen C.1 und C.2 sieht man, daß zumindest für kleine Werte von $mL \lesssim 6$ die Unterschiede zwischen $\bar{g}_r(mL)$ und $\hat{g}_r^{\mathbb{L}}(mL)$ selbst auf dem kleinsten untersuchten Gitter, einem 12^4 -Gitter, vernachlässigbar sind. Für die Analyse können aus diesem Grund die numerisch schneller berechenbaren Kontinuums-Funktionen $\bar{g}_r(mL)$ benutzt werden. Die Gitterkorrekturen zu den Entwicklungspa-rameter β_n können in ähnlicher Weise ermittelt werden (s. Gl. (5.88) für $n = 1, 2, 3$).

ENDLICHES,
PERIODISCHES GITTER:

$$x \in (a\mathbb{Z}_L)^d$$

$$p \in \left(\frac{2\pi}{aL}\mathbb{Z}_L\right)^d$$

Volumen: $V = (aL)^d = L^d$

Ableitung:

$$\hat{\partial}_\nu f(x) = \frac{f(x + a\hat{\mu}) - f(x)}{a}$$

Impulssumme:

$$\frac{1}{(aL)^d} \sum_{p \in \left(\frac{2\pi}{aL}\mathbb{Z}_L\right)^d}$$

Funktionen im Fourier-Raum:

$$\tilde{f}\left(\hat{p}_\nu = \frac{2}{a} \sin \frac{ap_\nu}{2}\right)$$

UNENDLICHES GITTER:

$$x \in (a\mathbb{Z})^d$$

$$p \in \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]^d$$

Brillouin-Zone: $\mathcal{B} \equiv \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]^d$

Ableitung:

$$\hat{\partial}_\nu f(x) = \frac{f(x + a\hat{\mu}) - f(x)}{a}$$

Impulsintegration:

$$\int_{\mathcal{B}} \frac{d^d p}{(2\pi)^d}$$

Funktionen im Fourier-Raum:

$$\tilde{f}\left(\hat{p}_\nu = \frac{2}{a} \sin \frac{ap_\nu}{2}\right)$$

$$\begin{array}{c} a \\ \downarrow \\ 0 \end{array} (La = \text{const.})$$

Thermodynamischer Limes

&

Kontinuumsmlimes

$$\begin{array}{c} a \\ \downarrow \\ 0 \end{array}$$

TORUS BZW.
„PERIODISCHE BOX“:

$$x \in (-0, L]^d$$

$$p \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^d$$

Volumen: $V = L^d$

Ableitung: $\partial_\nu f(x)$

Impulssummation:

$$\frac{1}{L^d} \sum_{p \in \left(\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^d}$$

Funktionen im Fourier-Raum:

$$\tilde{f}(p)$$

EUKLIDISCHER RAUM:

$$x \in \mathbb{R}^d$$

$$p \in \mathbb{R}^d$$

Unendliches Volumen

Ableitung: $\partial_\nu f(x)$

Impulsintegration:

$$\int \frac{d^d p}{(2\pi)^d}$$

Funktionen im Fourier-Raum:

$$\tilde{f}(p)$$

Diagramm D: Die Wertebereiche von Orts- und Impulsraumkoordinaten im thermodynamischen – und im Kontinuumsmlimes (am Beispiel des Differenzenquotienten für die Nächsten-Nachbar-Wechselwirkung). Dieses Diagramm wird insbesondere bei der Diskussion der Gitter- und Volumeneffekte zu Rate gezogen.

Anhang D

Integration der Renormierungsgruppen- Gleichungen

Allgemein können n gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung für bekannte Funktionen $f_j(x, y_1, \dots, y_n)$ in folgender Form geschrieben werden [122]:

$$\frac{dy_j(x)}{dx} = f_j(x, y_1, \dots, y_n), \quad j = 1, \dots, n. \quad (\text{D.1})$$

In der Regel ist das Anfangswertproblem zu lösen, bei dem alle $y_j(x_0)$ zu einem Startpunkt x_0 vorgegeben sind, und uns die $y_j(x)$ an einem (beliebigen) Endpunkt x interessieren. Es kann aber auch ein Randwertproblem gestellt sein, bei dem gewisse Randbedingungen zu einem Startpunkt x_s und einem Endpunkt x_e zu erfüllen sind.

Eine Standardmethode zur Lösung des Anfangswertproblems ist das Runge-Kutta-Verfahren. Kurz die Idee für $n = 1$: In diesem Verfahren berechnet man beispielweise für eine Differentialgleichung $y' = f(x, y)$ einen Näherungswert $\bar{y}_{i+1}$ für $y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_i+h} f(t, y(t)) dt$ durch $\bar{y}_{i+1} = y_i + k$, indem man den Zuwachs k über Zwischenschritte gewinnt:

$$k_0 = 0, \quad k_j = hf \left(x_i + a_j h, y_i + \sum_{r=0}^{j-1} b_{jr} k_r \right) \quad \text{für } j = 1, 2, \dots, r \quad \text{und} \quad k = \sum_{j=1}^r g_j k_j. \quad (\text{D.2})$$

Die in diesen Schritten enthaltenen Parameter a_j , b_{jr} und g_j werden aus den Güteforderungen des Verfahrens bestimmt. Üblicherweise verlangt man, daß $w(h) = \int_{x_i}^{x_i+h} f(t, y(t)) dt - \sum_{j=1}^r g_j k_j$ für $h \rightarrow 0$ verschwindende Ableitungen $0 = w'(0) = \dots = w^{(l)}(0)$ möglichst hoher Ordnung l hat und bezeichnet l als Ordnung des Runge-Kutta-Verfahrens [113].

Das hier benutzte und bewährte Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung ist durch folgende Schritte definiert:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_i, y_i) & k_2 &= hf \left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1}{2} \right) \\ k_3 &= hf \left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2}{2} \right) & k_4 &= hf(x_i + h, y_i + k_3) \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Dann ist der Näherungswert:

$$\bar{y}_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \mathcal{O}(h^5). \quad (\text{D.4})$$

Ausgangspunkt für die Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen in der gebrochenen Phase der $O(N)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie ist das gekoppelte System von Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_R}{\partial m_R} &= \frac{\beta(m_R, g_R)}{m_R} ; & \frac{\partial \ln(Z/2\kappa)}{\partial m_R} &= \frac{2\gamma(m_R, g_R)}{m_R} ; \\ \frac{\partial \ln Z_O}{\partial m_R} &= \frac{\delta(m_R, g_R)}{m_R} ; & \frac{\partial \kappa}{\partial m_R} &= \epsilon(m_R, g_R)m_R Z_O \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

mit störungstheoretisch berechneten Renormierungsgruppen-Funktionen β , γ , δ und ϵ . Die Integration wird in [32] für den Parameter $x = m_R$ und die vier Variablen $y_1 = g_R$, $y_2 = \ln(Z/2\kappa)$, $y_3 = \ln Z_O$ und $y_4 = \kappa$ ausgeführt. Dementsprechend setzen sich die Fehler der Anfangswerte $y_j \pm \Delta y_j$ durch Variation der Startwerte der Integration innerhalb des Intervalls $[y_j - \Delta y_j, y_j + \Delta y_j]$ fort.

In Abschn. 6.2 müssen diese Gleichungen auf die in dieser Arbeit verwendeten Variablen m_R , Σ , Z und Z_O angepaßt werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_R}{\partial \kappa} &= \frac{1}{m_R Z_O \epsilon} ; & \frac{\partial \ln Z}{\partial \kappa} &= \frac{2\gamma}{m_R^2 Z_O \epsilon} + \frac{1}{Z\kappa} ; \\ \frac{\partial \ln Z_O}{\partial \kappa} &= \frac{\delta}{m_R^2 Z_O \epsilon} ; & \frac{\partial \Sigma}{\partial \kappa} &= \frac{\Sigma \left(1 + \gamma - \frac{\Sigma^2}{6Zm_R^2} \beta \right)}{m_R^2 Z_O \epsilon} + \frac{1}{2\kappa}, \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

wobei in den Renormierungsgruppen-Funktionen $g_R = 3Zm_R^2/\Sigma^2$ zu setzen ist. Der laufende Parameter ist hier $x = \kappa$, die vier Variablen $y_1 = m_R$, $y_2 = \ln Z$, $y_3 = \ln Z_O$ und $y_4 = \Sigma$. Die Fehlerfortpflanzung wird analog vollzogen. In diesem Fall wird auch ein (überbestimmtes) Randwertproblem gelöst, bei dem ein Startpunkt $(m_R(\kappa_1), \ln Z(\kappa_1), \Sigma(\kappa_1))$ und ein weiterer Punkt $(m_R(\kappa_2), \ln Z(\kappa_2), \Sigma(\kappa_2))$ vorgegeben sind. Dann wird, wie in Abschn. 6.2 beschrieben, der Startpunkt $Z_O(\kappa_1)$ so optimiert, daß die Integration der Renormierungsgruppen-Gleichungen ausgehend von Datenpunkt 1 den Endpunkt 2 bestmöglich annähert.

Anhang E

Zeta-Funktion

Die Zeta-Funktion $\mathcal{Z}_{lm}(s; q^2)$, die zunächst für beliebige Drehimpulszahlen (l, m) mit $\text{Re } 2s > l + 3$ durch

$$\mathcal{Z}_{lm}(s; q^2) = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} \mathcal{Y}_{lm}(\vec{n}) (\vec{n}^2 - q^2)^{-s}, \quad \mathcal{Y}_{lm}(\vec{n}) = |\vec{n}|^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (\text{E.1})$$

definiert ist, wird auf die Halbebene $\text{Re } s > 1/2$ analytisch fortgesetzt und nach der von M. Lüscher in [103, Anhang C] vorgeschlagenen Methode für $(l=0, m=0)$ sowie $s=1$ berechnet. Das Vorgehen ist sehr ähnlich dem Verfahren zur Berechnung der Volumenkorrekturen für $d=3$ (s. Anhang C – hier!).

Definieren wir Vielfachheiten $w_j = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} \delta_{\vec{n}^2, j}$, so kann die Zeta-Funktion $\mathcal{Z}_{00}(s; q^2)$ in der folgenden Form geschrieben werden:

$$\sqrt{4\pi} \mathcal{Z}_{00}(s; q^2) = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} (\vec{n}^2 - q^2)^{-s} = \sum_{j=0}^{\infty} w_j (j - q^2)^{-s} \quad (\text{E.2})$$

Um benötigte die Laplace-Transformation von der Art (C.11) anwenden zu können, muß $\text{Re}(j - q^2) > 0$ sein. Deswegen werden die negativen Summanden absepariert. Die folgende Reihenentwicklung ist gültig für $q^2 \in [-\bar{n} + 1, \bar{n} - 1]$

$$\sqrt{4\pi} \mathcal{Z}_{00}(s; q^2) = \sum_{j=0}^{\bar{n}} w_j (j - q^2)^{-s} + R(s, q^2) \quad (\text{E.3})$$

$$\text{mit} \quad R(s, q^2) = \int_0^{\infty} d\lambda \frac{\lambda^{s-1}}{\Gamma(s)} e^{\lambda q^2} \sum_{j=\bar{n}+1}^{\infty} w_j e^{-\lambda j}$$

Setzt man $\text{Re } s > 3/2$ voraus so kann die Singularität des Integranden für Werte von $\lambda \rightarrow 0$ abgespalten und ausintegriert werden. Es verbleibt ein für $\text{Re } s > 1/2$ regulärer Ausdruck mit einer Polstelle für $s=3/2$ ¹:

$$\begin{aligned} R(s, q^2) = & \int_0^1 d\lambda \frac{\lambda^{s-1}}{\Gamma(s)} \left(e^{\lambda q^2} \sum_{j=\bar{n}+1}^{\infty} w_j e^{-\lambda j} - \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^{3/2} \right) \\ & + \int_1^{\infty} d\lambda \frac{\lambda^{s-1}}{\Gamma(s)} e^{\lambda q^2} \sum_{j=\bar{n}+1}^{\infty} w_j e^{-\lambda j} + \frac{\pi^{3/2}}{\Gamma(s)(s-3/2)} \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

¹Für $s=1$ kann der „Pol“ auch in den Integranden des zweiten Termes hineingezogen werden.

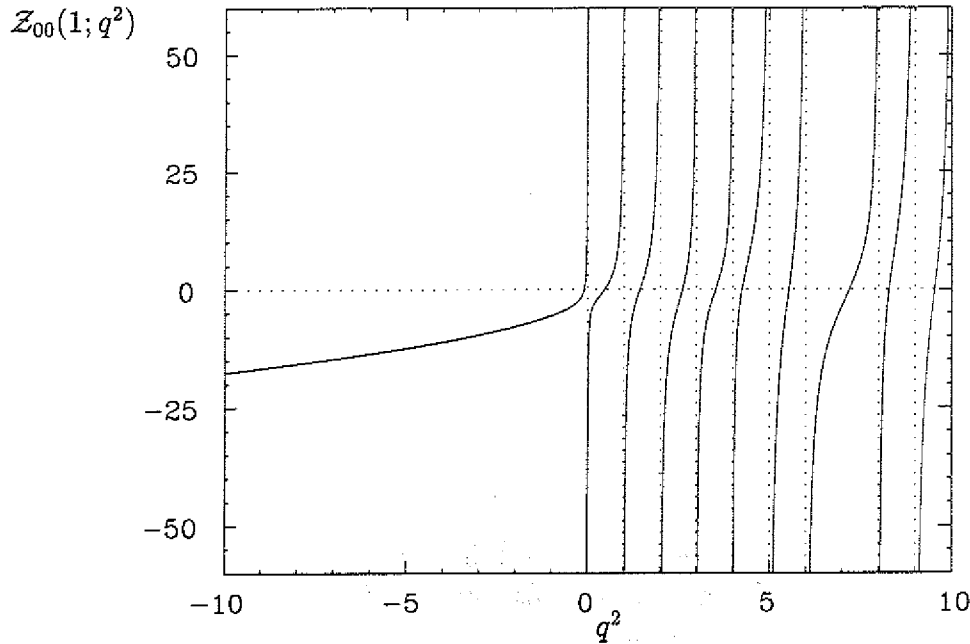


Abbildung E.1: Die Zeta-Funktion $Z_{00}(1; q^2)$. Die senkrechten gepunkteten Linien markieren die Singularitäten der Funktion bei $q^2 = \bar{n}^2$ ($\bar{n} \in \mathbb{Z}^3$). Der Index $I(q^2)$ nummeriert die Intervalle zwischen den Nullstellen der Funktion (bei $q^2 = 0$ mit 0 beginnend) und ordnet diesen Wert der Variablen q^2 zu.

Mit Hilfe der Identität $\theta(\lambda/\pi) = (\pi/\lambda)^{3/2} \theta(\pi/\lambda)$ (s. Gl. (C.6)) für die θ -Funktion $\theta(\lambda/\pi) = \sum_{j=0}^{\infty} w_j e^{-\lambda j}$ (s. Gl. (C.5)) und durch Sortieren der Summanden erhalten wir folgenden Ausdruck für den Restterm $R(1, q^2)$ für $s=1$:

$$R(1, q^2) = -2\pi^{3/2} + \int_0^1 d\lambda \left\{ \frac{1}{\lambda^2} \sum_{j=\bar{n}+1}^{\infty} w_j e^{(q^2-j)/\lambda} - \sum_{j=0}^{\bar{n}} w_j e^{(q^2-j)\lambda} + \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^{3/2} \left((e^{\lambda q^2} - 1) + e^{\lambda q^2} \sum_{j=1}^{\infty} w_j e^{-j\pi^2/\lambda} \right) \right\}. \quad (\text{E.5})$$

Die Integrale sind wohl konditioniert und können mit Chebyshev-Integration integriert werden [122].

Die Zeta-Funktion $Z_{00}(1; q^2)$ ist in Abbildung E.1 dargestellt. Schon an der Definition (E.1) sieht man, daß sie für

$$q^2 \in S_{\infty} = \left\{ j \in \mathbb{N}_0 \mid \exists \bar{n} \in \mathbb{Z}^3 : j = |\bar{n}| \right\} \quad (\text{E.6})$$

Singularitäten hat.² Für diese positiven ganzzahligen Werte von q^2 kann man die

² S_{∞} ist gleichbedeutend mit der Menge der natürlichen Zahlen, für die die Vielfachheit $w_j \neq 0$ ist.

j	$Z_{00}(1; j)$
0	- 8.913632917
1	- 1.211335679
2	- 5.096565793
3	- 6.774237674
4	9.536262690
5	7.017931686
6	- 23.19842616
8	21.73967973
9	11.77938544

Tabelle E.1: Werte der subtrahierten Zetafunktion $Z_{00}(1; j)$ (Es gibt kein $\vec{n} \in \mathbb{Z}^3$ mit $|\vec{n}|=7$, d.h. $w_7 = 0$)

subtrahierte Zeta-Funktion $Z_{00}(s; j)$ definieren:

$$Z_{00}(s; j) = \lim_{q^2 \rightarrow j} \left\{ \sqrt{4\pi} Z_{00}(s; q^2) - \frac{w_j}{(j - q^2)^s} \right\}. \quad (\text{E.7})$$

Die Werte dieser Funktion gehen in die asymptotische Entwicklung der Zetafunktion $Z_{00}(1; q^2)$ für $q^2 \approx j$ aus [102] ein

$$\sqrt{4\pi} Z_{00}(1; q^2) = \frac{w_j}{j - q^2} + Z_{00}(1; j) + (q^2 - j)Z_{00}(2; j) + \dots \quad (\text{E.8})$$

und sind in Tabelle E.1 tabelliert.

Da die Singularitäten mit einem Vorzeichenwechsel verbunden sind, besitzt die Zeta-Funktion auch Nullstellen. Die Nullstellen sind deshalb interessant, da für diese Werte von q^2 ,

$$q^2 \in S_0 = \left\{ q_{(0)}^2 \in \mathbb{R} \mid Z_{00}(1; q_{(0)}^2) = 0 \right\} \quad (\text{E.9})$$

eine Resonanz erwartet wird (s. Kapitel 8): Der Nenner in der Definition der Funktion $\phi(q)$ wird singulär und die Streuphase muß folglich $\frac{\pi}{2} \bmod \pi$ sein. Die Nullstellen $q_{(0),i}$ werden mit einem numerischen Standardverfahren bestimmt und werden mit dem Index i von 0 beginnend durchnummeriert. Den Werten q^2 in den Intervallen $(q_{(0),i-1}, q_{(0),i})$ zwischen zwei aufeinanderfolgenden Nullstellen wird der Index $I(q^2) = i$ der Nullstelle am rechten Rand zugewiesen. Die Nullstellen sind in Tabelle E.2 für $q^2 < 9$ aufgelistet [104]. Ihre Werte werden zur Wahl der Simulationspunkte (κ, J) und Gittergrößen L herangezogen.

Trotz der Singularitäten und Nullstellen kann mittels der durch die Gleichungen (E.4) und (E.5) definierten Zeta-Funktion die in Gleichung (8.21) eingeführte Funk-

Intervall				
Index	$j_1 < q_{(0)}^2 < j_2$		$q_{(0)}^2$	$q_{(0)}$
-1	$-\infty$	0	-0.095900719	
0	0	1	0.472894247	0.687673067
1	1	2	1.441591313	1.200662864
2	2	3	2.627007612	1.620804619
3	3	4	3.536619947	1.880590319
4	4	5	4.251705973	2.061966531
5	5	6	5.537700774	2.353231985
6	6	8	7.196263202	2.682585171
7	8	9	8.287953655	2.878880625
8	9	10	9.534531427	3.087803657

Tabelle E.2: Nullstellen der Zetafunktion $Z_{00}(1; j)$. Dementsprechend ist der Index $I(q^2) = i$ den Werten $q_{(0),i-1}^2 < q^2 \leq q_{(0),i}^2$ zugewiesen.

tion $\phi(q)$ als stetige Funktion mit $\phi(0) = 0$ dargestellt werden:

$$\phi(q) = \begin{cases} \arctan\left(-\frac{\pi^{3/2}q}{Z_{00}(1; q^2)}\right) + I(q^2)\pi & (q^2 \notin S_\infty, S_0) \\ I(q^2)\pi & (q^2 \in S_\infty) \\ \frac{\pi}{2} + I(q^2)\pi & (q^2 \in S_0) \\ \frac{\pi}{2} + \frac{Z_{00}(1; q^2)}{\pi^{3/2}q} + I(q^2)\pi & (q^2 \approx q_{(0)}^2 \in S_0) \end{cases} \quad (\text{E.10})$$

Die Fallunterscheidungen berücksichtigen die Standardberechnung, den Sprung zwischen den Energieniveaus, den Wert bei der Resonanz und in der Umgebung der Resonanz (vgl. Gl. 8.20).

Literaturverzeichnis

STANDARD-MODELL UND SCHRANKEN FÜR DIE HIGGS-MASSE

- [1] E.S. Abers und B.W. Lee, *Gauge Theories*, Phys. Rep. 9C (1973) 1.
- [2] C. Berger, *Teilchenphysik*, (Springer Verlag, Berlin, 1992).
- [3] J.R. Carter, *Precision Tests of the Standard Model at LEP*, in Joint Lepton-Photon Symposium and Int. Europhysics Conf. on High Energy Physics, Geneva, Switzerland, Aug 25 - Jul 1, 1991, Vol. 2, Hrsg. S. Hegarty et al., (World Scientific, Singapore, 1992) 3.
- [4] R. Dashen und H. Neuberger, *How to get an upper bound on the Higgs mass*, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1897.
- [5] M. Davier, *Search for new particles at LEP*, in Joint Lepton-Photon Symposium and Int. Europhysics Conf. on High Energy Physics, Geneva, Switzerland, Aug 25 - Jul 1, 1991, Vol. 2, Hrsg. S. Hegarty et al., (World Scientific, Singapore, 1992) 153;
J. Ellis, *Status of the electroweak interaction*, ibd. 29.
- [6] F. Englert und R. Brout, *Broken Symmetry and the Mass of Gauge Vector Mesons*, Phys. Rev. Lett. 13 (1964) 321;
P.W. Higgs, *Broken Symmetries, Massless Particles and Gauge Fields*, Phys. Lett. 12 (1964) 132, *Spontaneous Symmetry Breakdown without Massless Bosons*, Phys. Rev. 145 (1966) 1156.
- [7] H. Fritzsch und M. Gell-Mann, *Current Algebra: Quarks and what else?*, in XVth International Conference on High Energy Physics, Hrsg. J.D. Jackson, A. Roberts, (Batavia, 1972) Vol.2, 135;
M. Gell-Mann, *Quarks*, Acta Phys. Austriaca Suppl. IX (1972) 733;
H. Fritzsch, M. Gell-Mann und H. Leutwyler, *Advantages of the Color Octet Gluon Picture*, Phys. Lett. 47B (1973) 365;
D. Gross und F. Wilczek, *Ultraviolet Behavior of Non-Abelian Gauge Theories*, Phys. Rev. Lett. 30 (1973) 1343;
S. Weinberg, *Non-Abelian Gauge Theories of the Strong Interactions*, Phys. Rev. Lett. 31 (1973) 494.
- [8] H. Georgi und S.L. Glashow, *Gauge Theories without Anomalies*, Phys. Rev. D6 (1972) 429;
D.J. Gross und R. Jackiw, *Effect of Anomalies on Quasi-Renormalizable Theories*, Phys. Rev. D6 (1972) 477.

- [9] S.L. Glashow, *Partial-symmetries of Weak Interactions*, Nucl. Phys. **22** (1961) 579;
S. Weinberg, *A Model of Leptons*, Phys. Rev. Lett. **19** (1967) 1264;
A. Salam, *Weak and Electromagnetic Interactions*, in Proceedings of the 8th Nobel Symposium, Hrsg. N. Svartholm (Stockholm, 1968) 367.
- [10] J. Goldstone, *Field theories with «superconductor» solutions*, Nuovo Cimento **19** (1961) 154;
J. Goldstone, A. Salam und S. Weinberg, *Broken symmetries*, Phys. Rev. **127** (1962) 965.
- [11] M.B. Green, J.H. Schwarz und E. Witten, *Superstring Theory – Vol.I: Introduction; Vol.II: Loop Amplitudes, Anomalies and Phenomenology*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1987);
M. Kaku, *“Introduction to Superstrings”*, (Springer Verlag, New York, 1988).
- [12] E. Gross, *The Search for the SM Higgs Boson at LEP-I, A comparative Study*, Preprint CERN-PPE/92-91 (1992);
E. Gross und P. Yepes, *SM Higgs boson hunting at LEP*, Preprint CERN-PPE/92-153 (1992).
- [13] G. 't Hooft, *Renormalization of Massless Yang-Mills Fields*, Nucl. Phys. **B33** (1971) 173;
G. 't Hooft und M. Veltman, *Combinatorics of Gauge Fields*, Nucl. Phys. **B50** (1972) 318.
- [14] J. Kuti und Y. Shen, *Supercomputing the effective action*, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 85;
J. Kuti, L. Lin und Y. Shen, *Upper bound on the Higgs mass in the standard model*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 678;
J. Kuti, L. Lin und Y. Shen, *Nonperturbative lattice study of the Higgs sector in the standard model*, in Lattice Higgs Workshop, Hrsg. B. Berg et al. (World Scientific, Singapore, 1988) 140;
J. Kuti, L. Lin und Y. Shen, *Fate of the standard model with a heavy Higgs particle*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **4** (1988) 397;
J. Kuti, *The Higgs meson problem*, in Proceedings of the XXIV. International Conference on High Energy Physics, Munich 1988, Hrsg. R. Kotthaus und J.H. Kühn (Springer, 1989) 814.
- [15] A.D. Linde, *Dynamic Reconstruction of Symmetry and Limitations on the Masses and Coupling Constants in the Higgs Model*, JETP Lett. **23** (1976) 64;
S. Weinberg, *Mass of the Higgs boson*, Phys. Rev. Lett. **36** (1976) 294-296;
- [16] M. Lindner, *Implications of Triviality for the Standard Model*, Z. Phys. **31** (1986) 295;
M. Lindner, M. Sher und H.W. Zaglauer, *Probing Vacuum Stability Bounds at the Fermilab Collider*, Phys. Lett. **B228** (1989) 139.
- [17] T. Neuhaus, *Upgrade of results from Monte Carlo study of the $O(4)$ invariant $\lambda\Phi^4$ model in the broken phase*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **9** (1989) 21;
A. Hasenfratz, K. Jansen, J. Jersák, C.B. Lang, T. Neuhaus und H. Yoneyama, *Study of the four component Φ^4 model*, Nucl. Phys. **B317** (1989) 81.

- [18] M.M. Tsypin, Lebedev Inst. Preprint 280 (1985); *Monte Carlo computation of the effective potential for lattice Φ^4 theory and the upper bound on the Higgs mass*, in Lattice Higgs Workshop, Hrsg. B. Berg et al. (World Scientific, Singapore, 1988) 258; A. Hasenfratz, K. Jansen, C. B. Lang, T. Neuhaus und H. Yoneyama, *The triviality bound of the four component Φ^4 model*, Phys. Lett. B199 (1987) 531; W. Langguth und I. Montvay, *A numerical estimate of the upper limit for the Higgs boson mass*, Z. Phys. C36 (1987) 725; M. Lüscher und P. Weisz, *Is there a strong interaction sector in the standard lattice Higgs model?*, Phys. Lett. B212 (1988) 472; P. Hasenfratz und J. Nager, *The cutoff dependence of the Higgs meson mass and the onset of new physics in the standard model*, Z. Phys. C37 (1988) 477; A. Hasenfratz und T. Neuhaus, *Upper bound estimate for the Higgs mass from the lattice regularized Weinberg-Salam model*, Nucl. Phys. B297 (1988) 205.
- [19] Particle Data Group, *Review of Particle Properties*, Phys. Rev. D45 (1992).
- [20] C. Rubbia, *Future high-energy physics facilities*, in Joint Lepton-Photon Symposium and Int. Europhysics Conf. on High Energy Physics, Geneva, Switzerland, Aug 25 - Jul 1, 1991, Vol. 2, Hrsg. S. Hegarty et al., (World Scientific, Singapore, 1992) 441.
- [21] D. Schaile und P.M. Zerwas, *Measuring the weak isospin of b quarks in e^+e^- annihilation*, Phys. Rev. D45 (1992) 3262-3265.
- [22] UA1-Kollaboration, *Experimental Observation of Isolated Large Transverse Energy Electrons with Associated Missing Energy at $\sqrt{s} = 540$ GeV*, Phys. Lett. B122 (1983) 103; *Experimental Observation of Lepton Pairs of Invariant Mass around $95 \text{ GeV}/c^2$ at the CERN SPS Collider*, Phys. Lett. B126 (1983) 398; UA2-Kollaboration, *Observation of Single Isolated Large Electrons of High Transverse Momentum in Events with Missing Transverse Energy at the CERN $\bar{p}p$ Collider*, Phys. Lett. B122 (1983) 476; *Evidence for $Z^0 \rightarrow e^+e^-$ at the CERN $\bar{p}p$ Collider*, Phys. Lett. B129 (1983) 130.

GITTERREGULARISIERUNG, TRIVIALITÄT, HIGGS- UND YUKAWA-MODELLE

- [23] C.R. Allton et al., *First Results from the UKQCD Collaboration*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 26 (1992) 211-216.
- [24] M. Aizenman, *Proof of the Triviality of Φ^4 in d -dimensions Field Theory and Some Mean Field Features of Ising Models for $d > 4$* , Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 1; M. Aizenman, *Geometric Analysis of Φ^4 Fields and Ising Models*, Comm. Math. Phys. 86 (1988) 1; J. Fröhlich, *On the Triviality of $\lambda\Phi^4$ in d -dimensions Theories and the Approach to the Critical Point in $d \geq 4$ -dimensions*, Nucl. Phys. 200 [FS 4] (1982) 281-296.
- [25] W. Bock, *Das Fermion-Spektrum in dem chiralen $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ -Fermionen-Higgs-Modell auf dem Gitter*, Dissertation (Aachen, 1991); T. Trappenberg, *Eigenschaften einiger Feldtheorien mit spontaner Symmetriebrechung auf endlichen Gittern*, Dissertation (Aachen, 1992).

- [26] C. Frick, *Nicht-perturbative Untersuchung einer starken Yukawa-Kopplung im Standard-Modell auf dem Gitter*, Dissertation (Aachen, 1993).
- [27] A.K. De und J. Jersák, *Yukawa models on the lattice*, in Heavy Flavours, Hrsg. A.J. Buras und M. Lindner (World Scientific, Singapore, 1992) 732.
- [28] R.P. Feynman, *Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics*, Rev. Mod. Phys. **20**, (1948) 367;
R.P. Feynman und A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [29] G. Keller, C. Kopfer und M. Salmhofer, *Perturbative Renormalization an effective Lagrangians in Φ_4^4 in four dimensions*, Helv. Phys. Acta **65** (1992) 32-52;
G. Keller, *The perturbative Construction of Symanzik's improved action for Φ_4^4 and QED₄*, Preprint MPI-PTh/92-6 (München, 1992).
- [30] M. Lüscher und P. Weisz, *Scaling laws and triviality bounds in the lattice Φ^4 theory - 1. One component model in the symmetric phase*, Nucl. Phys. **B290** (1987) 25; -
2. *One component model in the phase with spontaneous symmetry breaking phase*, Nucl. Phys. **B295** (1988) 65.
- [31] M. Lüscher und P. Weisz, *Application of the linked cluster expansion to the n component Φ^4 theory*, Nucl. Phys. **B300** [FS22] (1988) 325-359.
- [32] M. Lüscher und P. Weisz, *Scaling laws and triviality bounds in the lattice Φ^4 theory - 3. n component model*, Nucl. Phys. **B318** (1989) 705.
- [33] M. Lüscher, *Improved Lattice gauge theories*, Lectures given at Les Houches (1984), in Critical phenomena, random systems, gauge theories, Hrsg. K. Osterwalder und R. Stora, (North Holland, Amsterdam, 1986).
- [34] T. Reisz, *A power counting theorem for Feynman integrals on the lattice*, Comm. Math. Phys. **116** (1988) 81; *Renormalization of Feynman integrals on the lattice*, Comm. Math. Phys. **117** (1988) 79.
- [35] G. Roepstorff, *Quantenfeldtheorie II*, Vorlesung an der RWTH Aachen (Sommersemester 1988); *Pfadintegrale in der Quantenphysik*, (Vieweg, Braunschweig, 1992).
- [36] B. Sheikholeslami und R. Wohlert, *Improved continuum limit lattice action for QCD with Wilson fermions*, Nucl. Phys. **B259** (1985) 572.
- [37] J. Shigemitsu, *The lattice $\lambda\Phi^4$ model with Yukawa couplings to staggered fermions*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **9** (1989) 96; *Yukawa couplings on the lattice*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **17** (1990) 657;
M.F.L. Golterman, *Lattice chiral gauge theories: Results and problems*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **20** (1991) 528;
W. Bock, *Investigation of the fermion spectrum at strong Wilson-Yukawa coupling in the symmetric phase*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **26** (1992) 220-227.
- [38] K. Symanzik, *Some topics in quantum field theory*, in Mathematical problems in theoretical physics, Hrsg. R. Schrader et al., Lecture notes in physics **153** (Springer, Berlin, 1982).

- [39] K. Symanzik, *Continuum Limit and improved action in lattice theories, I. Principles and Φ^4 -theory*, Nucl. Phys. B226 (1983) 187; *II. $O(N)$ nonlinear sigma model in perturbation theory*, Nucl. Phys. B226 (1983) 205.
- [40] K.G. Wilson, *Confinement of Quarks*, Phys. Rev. D10 (1974) 2445.
- [41] K.G. Wilson und J. Kogut, *The renormalization group and the ϵ expansion*, Phys. Rep. 12C (1974) 75-200.

NUMERISCHE METHODEN UND ALGORITHMEN

- [42] S.L. Adler, *An overrelaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions*, Phys. Rev. D23 (1981) 2901.
- [43] A. Brandt, *Multigrid methods in lattice field computations*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 26 (1992) 137-180;
W. Hackbusch, *Multi-grid methods and its applications*, (Springer Verlag, Heidelberg, 1985);
G. Wittum, *Incomplete decompositions and multi-grid methods*, (Birkhäuser Verlag, Basel, 1985).
- [44] S. Caracciolo, R.G. Edwards, A. Pelissetto und A.D. Sokal, *Wolff-type embedding algorithm for general nonlinear σ -models*, Tallahassee Preprint FSU-SCRI-92-65.
- [45] R.G. Edwards und A.D. Sokal, *Dynamic critical behavior of Wolff's collective mode Monte Carlo algorithm for the two-dimensional $O(N)$ nonlinear σ model*, Phys. Rev. D40 (1989) 1374-1377.
- [46] H.G. Evertz, *Vectorized Cluster search*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 26 (1992) 620-622.
- [47] M. Falcioni, E. Marinari, M.L. Paciello, G. Parisi und B. Taglienti, *Complex zeros in the partition function of the four-dimensional $SU(2)$ lattice gauge model*, Phys. Lett. B108 (1982) 331;
A.M. Ferrenberg und R.H. Swendsen, *New Monte Carlo technique for studying phase transitions*, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2635-2638.
- [48] A.M. Ferrenberg und R.H. Swendsen, *Optimized Monte Carlo data analysis*, Phys. Rev. Lett. 63 (1989) 1195.
- [49] C.M. Fortuin und P.W. Kasteleyn, *On the Random-Cluster Model, I. Introduction and the Relation to Other Models*, Physica 57 (1972) 536;
P.W. Kasteleyn und C.M. Fortuin, J. Phys. Soc. Japan 26 (Suppl.) (1969) 11.
- [50] C. Frick, K. Jansen und P. Seufferling, *Cluster algorithm in the $O(4)$ Φ^4 theory in 4 dimensions*, Phys. Rev. Lett. 63 (1989) 2613;
C. Frick, *Das Spektrum der vierkomponentigen Φ^4 -Theorie in der symmetrischen Phase auf endlichen Gittern*, Diplomarbeit (Aachen, 1989) 107 Seiten.
- [51] J. Goodman und A.D. Sokal, *Multigrid Monte Carlo method. Conceptual foundations*, Phys. Rev. D40 (1989) 2035-2071.

- [52] J. Hoshen und R. Kopelman, *Percolation and Cluster Distribution. I. Cluster Multiple Labeling Technique and the Concentration Algorithm*, Phys. Rev. B14 (1976) 3438.
- [53] F. James, *A review of pseudorandom number generators*, Computer Phys. Commun. 60 (1990) 329-344.
- [54] S. Kirkpatrick und E.P. Stoll, *A Very Fast Shift-Register Sequence Random Generator*, J. Comput. Phys. 40 (1981) 517.
- [55] G. Marsaglia, B. Narasimhan und A. Zaman, *A random number generator for PC's*, Computer Phys. Commun. 60 (1990) 345-349.
- [56] N.A. Metropolis, M.N. Rosenbluth, A.H. Rosenbluth, E. Teller und J. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. 21 (1953) 1087.
- [57] H. Mino, *A vectorized algorithm for cluster formation in the Swendsen-Wang dynamics*, Computer Phys. Commun. 66 (1991) 25-30.
- [58] E. Nummelin, *General irreducible Markov chains and non-negative operators*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1984).
- [59] A.D. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithm*, in Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, (Lousanne, June 1989), 71 Seiten;
A.D. Sokal, *How to beat critical slowing down: 1990 update*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 20 (1991) 55-67.
- [60] R.H. Swendsen und J.-S. Wang, *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 86-88.
- [61] J.-S. Wang, *Clusters in the three-dimensional Ising model with a magnetic field*, Physica A161 (1989) 249.
- [62] U. Wolff, *Collective Monte Carlo updating for spin systems*, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 361;
U. Wolff, *Collective Monte Carlo updating in a high precision study of the X-Y model*, Nucl. Phys. B322 (1989) 759.
- [63] U. Wolff, *Comparison between cluster Monte Carlo algorithms in the Ising model*, Phys. Lett. B228 (1989) 379.
- [64] U. Wolff, *Asymptotic freedom and mass generation in the $O(3)$ nonlinear sigma model* (DESY 89-021); Phys. Lett. B222 (1989) 473. Nucl. Phys. B334 (1990) 581.
- [65] U. Wolff, *Critical slowing down*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 17 (1990) 93.
- [66] U. Wolff, *High precision simulations with fast algorithms*, in Lectures at the 31st Int. Univ. for Nuclear and Particle Physics. Computational methods in Field Theory, Schladming, Austria, Feb 1-8, 1992;
U. Wolff, *High precision simulation techniques for lattice field theory*, Vortrag bei der International Conference on Computational Physics PC92, Prague, Czechoslovakia, Aug 24-28, 1992, Preprint CERN-TH-6636-92 (1992).

VOLUMENEFFEKTE UND EFFEKTIVE FELDTHEORIEN

- [67] R. Dashen, *Chiral $SU(3) \otimes SU(3)$ as a Symmetry of the Strong Interactions*, Phys. Rev. **183** (1969) 1245; *Some Features of Chiral Symmetry Breaking*, Phys. Rev. **D3** (1971) 1879;
S. Weinberg, *Nonlinear Realizations of Chiral Symmetry*, Phys. Rev. **166** (1968) 1568.
- [68] R. Fukuda und E. Kyriakopoulos, *Derivation of the effective potential*, Nucl. Phys. **B85** (1975) 354;
L. O’Raifeartaigh, A. Wipf und H. Yoneyama, *The constraint effective potential*, Nucl. Phys. **B271** (1986) 653;
A. Ringwald und C. Wetterich, *Average action for the n component Φ^4 theory*, Nucl. Phys. **B334** (1990) 506;
C. Wetterich, *Average action and the renormalization group equations*, Nucl. Phys. **B352** (1991) 529-584.
- [69] J. Gasser und H. Leutwyler, *Chiral perturbation theory to one loop*, Ann. Phys. **158** (1984) 142.
- [70] J. Gasser und H. Leutwyler, *Spontaneously broken symmetries: Effective lagrangians at finite volume*, Nucl. Phys. **B307** (1988) 763-778;
H. Leutwyler, *QCD: low temperature expansion and finite size effects*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **4** (1988) 248.
- [71] J. Gasser und H. Leutwyler, *Light quarks at low temperatures*, Phys. Lett. **184B** (1987) 83; *Thermodynamics of chiral symmetry*, Phys. Lett. **188B** (1987) 477;
H. Leutwyler, *Energy levels of light quarks confined in a box*, Phys. Lett. **189B** (1987) 197-202.
- [72] K. Gawedzki und A. Kupiainen, *A rigorous block spin approach to massless lattice theories*, Commun. Math. Phys. **77** (1980) 31; *Massless lattice Φ^4 in four-dimensions theory: a nonperturbative control of a renormalizable model*, Commun. Math. Phys. **99** (1985) 197.
- [73] M. Göckeler, *Distribution of the mean magnetization in $O(N)$ -symmetric spin models and chiral perturbation theory*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **17** (1990) 347-349;
M. Göckeler und H. Leutwyler, *The constraint effective potential for $O(N)$ symmetric spin models*, Phys. Lett. **B253** (1991) 193-199; *Shape of the constraint effective potential*, Nucl. Phys. **B350** (1991) 228-262.
- [74] M. Göckeler, K. Jansen und T. Neuhaus, *Constraint effective potential and the σ -mass in the $O(4)$ - Φ^4 -theory*, Phys. Lett. **B273** (1991) 450-456;
I. Dimitrovic, J. Nager, K. Jansen und T. Neuhaus, *Shape of the constraint effective potential: a Monte Carlo study*, Phys. Lett. **B268** (1991) 408-414.
- [75] M. Göckeler und H. Leutwyler, *Constraint correlation functions in the $O(N)$ -model*, Nucl. Phys. **B361** (1991) 392-414.
- [76] A. Hasenfratz, K. Jansen, J. Jersák, H.A. Kastrup, C.B. Lang, H. Leutwyler und T. Neuhaus, *Goldstone bosons and finite size effects: A numerical study of the $O(4)$ model* Nucl. Phys. **B356** (1991) 332-366.

- [77] P. Hasenfratz und H. Leutwyler, *Goldstone boson related finite size effects in field theory and critical phenomena with $O(N)$ symmetry*, Nucl. Phys. B343 (1990) 241-284.
- [78] U.M. Heller und H. Neuberger, *The finite size effects of goldstone bosons in Monte Carlo simulations*, Phys. Lett. B207 (1988) 189;
C.B. Lang, *Monte Carlo study of the $O(4)$ Φ^4 model*, in Lattice Higgs Workshop, Hrsg. B. Berg et al. (World Scientific, Singapore, 1988) 158;
K. Jansen, *Finite size study of the four-dimensional Ising model*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 4 (1988) 422;
A. Hasenfratz, K. Jansen, J. Jersák, C.B. Lang, H. Leutwyler und T. Neuhaus, *Finite size effects and spontaneously broken symmetries: the case of the $O(4)$ -model*, Z. Phys. C46 (1990) 257.
- [79] G. Mack, T. Kalkreuther, G. Palma und M. Speh, *Effective field theories*, in Lectures at the 31st Int. Univ. for Nuclear and Particle Physics, Computational methods in Field Theory, Schladming, Austria, Feb 1-8, 1992.
- [80] H. Neuberger, *Extracting physics from the lattice higgs model*, in Lattice Higgs Workshop, Hrsg. B. Berg et al. (World Scientific, Singapore, 1988) 197; *A better way to measure f_π in the linear sigma model*, Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 889; *Soft pions in large boxes*, Nucl. Phys. B300 (1988) 180.
- [81] Y. Shen, J. Kuti, L. Lin und S. Meyer, *Renormalized perturbation theory and new simulation results in the Φ^4 and $O(4)$ models*, in Lattice Higgs Workshop, Hrsg. B. Berg et al. (World Scientific, Singapore, 1988) 216;
L. Lin, J. Kuti und Y. Shen, *Finite size scaling analysis of the Higgs mass bound in the $O(4)$ approximation*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 9 (1989) 26.

SKALENVERHALTEN UND REGULARISIERUNGSABHÄNGIGKEIT

- [82] D. J. Amit, *Field theory, the renormalization group and critical phenomena*, (McGraw-Hill, New York, 1978).
- [83] G. Bhanot und K. Bitar, *Regularization dependence of the lattice Higgs-boson mass bound*, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 798; *ibid.* 2900 (E);
G. Bhanot und K. Bitar, *Lattice Higgs mass bounds and different cutoff schemes*, in Lattice Higgs Workshop, Hrsg. B. Berg et al. (World Scientific, Singapore, 1988) 21;
G. Bhanot, *How reliable are the lattice Higgs mass bounds*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 9 (1989) 18-20.
- [84] G. Bhanot, K. Bitar, U.M. Heller und H. Neuberger, *Φ^4 on F_4 : Analytical results*, Nucl. Phys. B343 (1990) 467-506.
- [85] G. Bhanot, *$O(4)$ on F_4* , Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 17 (1990) 653;
U.M. Heller, *Higgs Mass Bound on an F_4 Lattice*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 17 (1990) 649;
G. Bhanot, K. Bitar, U.M. Heller und H. Neuberger, *Φ^4 on F_4 : Numerical Results*, Nucl. Phys. B353 (1991) 551.

- [86] E. Brézin, J.C. Le Guillou und J. Zinn-Justin, *Field theoretical approach to critical phenomena*, in Phase transitions and critical phenomena, vol. VI, Hrsg. C. Domb und M.S. Green (Academic Press, London, 1976) 125-247.
- [87] M. Göckeler, *private Aufzeichnungen*.
- [88] P. Hasenfratz, *Finite size effects in field theory and critical phenomena with spontaneously broken $O(N)$ symmetry*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 9 (1989) 3.
- [89] C.B. Lang, *A study of rotational symmetry of the lattice Φ^4 model*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 17 (1990) 665-668; *Rotational symmetry of the lattice Higgs propagator*, Phys. Lett. 229B (1989) 97;
 U. Winkler, *Regularisierungsabhängigkeit und Rotationsinvarianz des vierdimensionalen Φ^4 -Modells*, Diplomarbeit (Graz, 1991);
 C.B. Lang und U. Winkler, *Rotational symmetry and regularization dependence in the Φ^4 in four-dimensions model*, Preprint UNIGRAZ-UTP-07-08-92 (Graz, 1992).
- [90] H. Neuberger, *Spinless fields on F_4 lattices*, Phys. Lett. 199B (1987) 536.
- [91] H. Neuberger, *Lattice Higgs and Yukawa models*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 17 (1990) 17-28;
 U.M. Heller, H. Neuberger und P. Vranas, *How to put a heavier Higgs on the lattice*, Phys. Lett. B283 (1992) 335-340.

STREUPHASEN UND ENERGIESPEKTREN IM ENDLICHEN VOLUMEN

- [92] P. van Baal, *Analytic methods from finite to infinite volumes*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 20 (1991) 3-15.
- [93] K.M. Bitar und P.M. Vranas, *Is there a rho in the $O(4)$ - $\lambda\Phi^4$ in four-dimensions theory?*, Phys. Lett. B284 (1992) 366-370;
 K.M. Bitar und P.M. Vranas, *The $I = 1, J = 1$ channel of the $O(4)$ - $\lambda\Phi^4$ in four-dimensions theory*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 30 (1993) 693.
- [94] J.D. Bjorken, *Elements of Quantum Chromodynamics*, in Proc. Summer Institute on Particle Physics, Hrsg. Anne Mosher, SLAC report No.224 (1980).
- [95] H.R. Fiebig und R.M. Woloshyn, *Meson-meson scattering in lattice QED_{2+1}* , Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 30 (1993) 883.
- [96] C. Frick, K. Jansen, J. Jersák, I. Montvay, P. Seufferling und G. Münster, *Numerical simulation of the scalar sector of the standard model in the symmetric phase*, Nucl. Phys. B331 (1990) 515-530.
- [97] C.R. Gatttringer und C.B. Lang, *Monte Carlo study of resonance scattering in 2-d lattice field theory*, Phys. Lett. B274 (1992) 95-99;
 C.R. Gatttringer und C.B. Lang, *Resonance scattering phase shifts in a 2-d lattice model*, Preprint UNIGRAZ-UTP-04-05-92;
 C.R. Gatttringer, I. Hip und C.B. Lang, *Scattering in a simple 2-d lattice model*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 30 (1993) 875.

- [98] P. Geiger und N. Isgur, *The quenched approximation in the quark model*, Phys. Rev. D41 (1990) 1595;
T.A. DeGrand, *Resonance masses from Monte Carlo simulations (with emphasis on the ρ -meson)*, Phys. Rev. D43 (1991) 2296-2300.
- [99] C. Itzykson, *Simple Integrable Systems, and Lie Algebras*, Int. Journ. Mod. Phys. A1 (1986) 65-115.
- [100] C. Itzykson und J.-M. Drouffe, *Statistical Field Theory – Vol. 1: From Brownian Motion to Renormalization and Lattice Gauge Theory; Vol.2 : Strong Coupling, Monte Carlo Methods, Conformal Field Theory, and Random Systems*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1989).
- [101] M. Lüscher, *Volume dependence of the energy spectrum in massive quantum field theories. 1. Stable particle states*, Comm. Math. Phys. 104 (1986) 177-206.
- [102] M. Lüscher, *Volume dependence of the energy spectrum in massive quantum field theories. 2. Scattering states*, Comm. Math. Phys. 105 (1986) 153-188;
M. Lüscher, *Selected topics in lattice field theory*, Lectures given at Les Houches (1988), in *Fields, Strings and Critical Phenomena*, Hrsg. E. Brézin und J. Zinn-Justin (North Holland, Amsterdam, 1989) 451-528.
- [103] M. Lüscher, *Two particle states on a torus and their relation to the scattering matrix*, Nucl. Phys. B354 (1991) 531-578.
- [104] M. Lüscher, *Signatures of unstable particles in finite volume*, Nucl. Phys. B364 (1991) 237-254.
- [105] M. Lüscher, *private Aufzeichnungen*.
- [106] M. Lüscher, *Vortragsreihe beim UK Institute for theoretical High Energy physicists*, (Cambridge, August 1991).
- [107] M. Lüscher und U. Wolff, *How to calculate the elastic scattering matrix in two-dimensional quantum field theories by numerical simulation*, Nucl. Phys. B339 (1990) 222-252.
- [108] C. Michael, *Particle decay in lattice gauge theory*, Nucl. Phys. B327 (1989) 515.
- [109] J. Nishimura, *Monte Carlo calculation of phase shift in four-dimensional $O(4)$ Φ^4 theory*, Phys. Lett. B294 (1992) 375-379.
- [110] P. Weisz, *Recent analytic progress on finite size effects*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 26 (1992) 111-125.
- [111] J. Westphalen, *Die Beschreibung von Resonanzen in der Φ^4 -Theorie auf dem Gitter*, Diplomarbeit (Aachen, März 1993) 93 Seiten.
- [112] U.-J. Wiese, *Identification of resonance parameters from the finite volume energy spectrum*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 9 (1989) 609.

MATHEMATISCHE UND PHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN

- [113] M. Abramowitz und I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Applied Mathematics Series 55, (Dover Publications, New York, 1968).
- [114] H.S.M. Coxeter, *Regular Polytopes*, (Dover Publications, New York, 1973).
- [115] R.B. Dingle, *Asymptotic Expansions, Their Derivation and Interpretation*, (London, New York, 1973) 131 ff.
- [116] A. Erdélyi et al., *Tables of integral transforms, vol. 2*, (McGraw-Hill, New York, 1954)
- [117] W. Gellert et al. (Hrsg.), *Kleine Enzyklopädie Mathematik*, (Leipzig, 1986).
- [118] I.S. Gradshteyn und I.M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, (Academic Press, New York, 1980)
- [119] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, (North Holland, Amsterdam, 1965).
- [120] A. Nobile und V. Roberto, *Efficient implementation of multidimensional fast Fourier transforms on a CRAY X-MP*, Comp. Phys. Commun. 40 (1986) 189; *MFFT: A package for two-dimensional and three-dimensional vectorized discrete Fourier transforms*, Comp. Phys. Commun. 42 (1986) 233;
A. Nobile, V. Roberto und F. Saitta, *MFFT4: Four dimensional vectorized fast Fourier transforms*, Comp. Phys. Commun. 48 (1988) 313.
- [121] L. O'Rai feartaigh, *Group Structure of Gauge Theories*, in Cambridge Monographs On Mathematical Physics, (Cambridge University Press, Cambridge, 1986).
- [122] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky und W.T. Vetterling, *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1988).

VERÖFFENTLICHUNGEN IM RAHMEN DER DISSERTATION

- [123] T. Neuhaus und F. Zimmermann, *Finite size effects in the broken phase of the $O(4)$ -symmetric Φ^4 -theory*, veröffentlicht in Ahrenschoop Symposium 1991, 205-213;
M. Göckeler, H.A. Kastrup, T. Neuhaus und F. Zimmermann, *Scaling analysis of the $O(4)$ -symmetric Φ^4 -theory in the broken phase*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 26 (1992) 516.
- [124] M. Göckeler, H.A. Kastrup, T. Neuhaus und F. Zimmermann, *Scaling analysis of the $O(4)$ -symmetric Φ^4 -theory in the broken phase*, Preprint: PITHA 92-21 (Aachen, Juni 1992), Jülich HLRZ 92-35, zur Veröffentlichung in Nucl. Phys. B.
- [125] M. Göckeler, H.A. Kastrup, J. Westphalen und F. Zimmermann, *Unstable particles in finite volume: The broken phase of the 4-d $O(4)$ non-linear σ -model*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 30 (1993) 879.

1. The first part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1863. It is a very important document, as it contains the President's message to Congress, and is one of the most important documents in the history of the United States.

2. The second part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1863. It is a very important document, as it contains the President's message to Congress, and is one of the most important documents in the history of the United States.

3. The third part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1863. It is a very important document, as it contains the President's message to Congress, and is one of the most important documents in the history of the United States.

4. The fourth part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1863. It is a very important document, as it contains the President's message to Congress, and is one of the most important documents in the history of the United States.

5. The fifth part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1863. It is a very important document, as it contains the President's message to Congress, and is one of the most important documents in the history of the United States.

6. The sixth part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1863. It is a very important document, as it contains the President's message to Congress, and is one of the most important documents in the history of the United States.

7. The seventh part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1863. It is a very important document, as it contains the President's message to Congress, and is one of the most important documents in the history of the United States.

Stichwortverzeichnis

- Abschneideimpuls (*cutoff*), 10, 21–23, 102–105
- äußere Quelle, äußerer Strom j , J , 28, 42–50, 53, 60, 62, 119, 127
- Asymptotische Freiheit, 39
- Aufdatierung (*update*), 38, 41–43, *siehe* Clusteralgorithmus
- Auflösungsvermögen, 9
- Autokorrelationsfunktion, 39
- Autokorrelationszeit, 39
- Baumgraphen-Näherung, 21, 75, 127, *siehe* Störungstheorie
- Besselfunktion, 46, 185
- β -Funktion, 22, 93–94
- Blocklänge l_{blk} , 144–148
- Blockmittel $\langle \dots \rangle_b$, 144, 146
- Blockspin, 67–68
- Boltzmannfaktor, 37
- Breit-Wigner-Formel, 129, 165
- Brillouin-Zone, 77, 185, 186
- Brownsche Bewegung, 39
- Callan-Symanzik-Gleichung, 93
- Chebyshev-Integration, 185, 190
- Chirale Störungstheorie, 60, *siehe* Störungstheorie
- Clusteralgorithmus, 40–44
 - Swendsen-Wang-Algorithmus, 40, 42, 171–173
 - Wolff-Algorithmus, 40, 43, 171
- Computerressourcen, 49, 142–143
- critical slowing down*, 39
- Detailliertes Gleichgewicht (*detailed balance*), 38, 171–173
- Diagonalisierungsverfahren, 144–146
- Dispersionsrelationen, 134
 - Gitterdispersionsrelation, 106–107, 135, 147
 - Kontinuumsdispersionsrelation, 107, 124, 134
- Divergenzen
 - Infrarote Divergenzen, 53, 68, 74
 - Ultraviolette Divergenzen, 25
- Doppelhistogramm, 48
- Drehimpulseigenzustände, 123
- effektive Wirkung, 55
- Eichtheorie, 17, 19
- Einbettung, 40–42, *siehe* Clusteralgorithmus
- eingeschränktes effektives Potential, 56–58, 67–68, 72
- 1-Teilchen-Zustände, 133–136
- Energiespektrum
 - 1-Teilchen-Spektrum, 133–136
 - 2-Teilchen-Spektrum, 144–155
- Ergodizität, 38, 171
- euklidische Feldtheorie, 26
- Exponentialfit, 144–145
- Familien, 18
- Farbe, 18
- Fehlerrechnung, 86, 149
- Felder
 - Feld auf dem Gitter Φ , 28
 - Feld im Kontinuum ϕ , 28
 - longitudinales Feld $\phi_{\parallel}$, 69
 - Pion-Feld π , 29, 55
 - σ -Feld σ , 29
 - transversales Feld $\phi_{\perp}$, 69
- Felderwartungswert Σ , 75
- Feldkonfiguration $\{\phi\}$, 37
- Femto-Universum, 115
- Feynman-Graphen, 53, 117
- Fortuin-Kasteleyn-Darstellung, 42, *siehe* Clusteralgorithmus

- Fouriertransformation, 138, 144, 178, 186
 Frustrationseffekte, 41,
 siehe Clusteralgorithmus
 Funktionalintegral, 26–27,
 siehe Pfadintegral
 Funktionalmaß, 26
 Gaußsche Integration, 176
 Gebrochene Phase, 29, 34
 Gitter,
 siehe Gitterregularisierung
 hyperkubisches Gitter, 27, 49
 zylindrisches Gitter, 142
 Gitter-Wirkung, 28
 Gitterabstand a , 29, 30, 186
 Gitterausdehnung L , 30, 49, 142, 186
 Gitterdispersionsrelation, 106–107, 135, 147
 Gittereffekte, 60, 147–148, 162, 184–185
 Gitterregularisierung, 25, 28
 Glashow–Salam–Weinberg Modell, 9, 20
 Goldstone–Bosonen, 20, 61, 68
 Goldstone–Theorem, 20, 61
 Großrechner, 43, 142
 Händigkeit, 18
 Hankel–Transformation, 58
 Helizitätsmodul, 62
 Higgs–Boson, 17, 111
 Higgs–Mechanismus, 19–21
 Histogramm–Methode, 47–49
 Hochtemperaturentwicklung, 33
 hyperkubisches Gitter, 27, 49,
 siehe Gitter
 infrarote Divergenzen, 53, 68, 74
 instabile Teilchen, 115, 128
 Ising–Modell, 40, 41
 Isospin, 127
 Isospin–Projektoren, 128
 Jackknife–Methode, 144
 Kinetische Energie, 45
 Kirkpatrick–Stoll–Greenwood
 Zufallszahlengenerator, 143
 Konfiguration, 37,
 siehe Feldkonfiguration
 Kontinuumsdispersionsrelation, 107, 124, 134
 Kontinuumslikes, 25–31, 186
 Kopplungen
 laufende Kopplung, 67
 nackte Kopplung g_0 , λ , 28, 92
 renormierte Kopplung g_R , 31, 75, 136
 Yukawa–Kopplung y , 19
 Korrelationsfunktionen, 69, 73
 Korrelationsfunktionsmatrix, 137–142
 Kosteneinheiten, 142
 kritischer Punkt, 27, 34
 Kubische Gruppe, 121, 123
 Kugelfunktionen, 122
 Kumulante, 34
 Lüscher'sche Theorie, 119–126
 Laplace–Transformation, 179
 Lebensdauer,
 siehe Zerfallsbreite
 Lebesgue–Integral, 26
 Leptonen, 18
 Logarithmische Korrekturen, 95–98,
 siehe Skalengesetze
 Magnetisierung, 49–51
 auf dem Gitter M , 45
 im Kontinuum $\mathcal{M}$, 56
 Markov–Prozeß, 38
 Massen
 Goldstone–Boson–Masse,
 Pion–Masse m_π , 29, 60, 62, 133–136
 Higgs–Masse, σ –Masse m_σ , 29, 74, 167
 nackte Masse m_0 , 28
 physikalische Masse, 74
 renormierte Masse m_R , 75
 Resonanzmasse, 165
 Massenerzeugung, 21
 Mehrgitter–Algorithmus (*multigrid*), 40

- Metropolis-Algorithmus, 38
- Molekularfeldnäherung, 95
- Monte-Carlo-Simulation, 37–40, 49, 142
- nichtperturbative Methoden,
 siehe Monte-Carlo-Simulation
- Niederenergie-Eigenschaften, 55, 61
- Obere Schranke an die Higgs-Masse, 101–111
- $O(N)$ -Symmetrie, 27, 62, 127
- Parallelisierung, 44
- Parametereinstellungen, 50, 131
- Partialwellenentwicklung, 128
- Pfadintegral, 26–27
- Phasenübergang, 25, 33
- Phasendiagramm, 33
- Pionen, 121, 127,
 siehe Goldstone-Bosonen
- Poissonschen Summationsformel, 178
- Polarisationseffekte, 53, 117
- Propagator
 - Impulsraumpropagator, 79, 136
 - π -Propagator, 79, 134–135
 - σ -Propagator, 78, 136
- Quantenchromodynamik (QCD), 17, 61
- Quarks, 18
- Regularisierung
 - Gitterregularisierung, 25, 28
- Regularisierungsabhängigkeit, 32, 104–111
- Renormierung, 73–75
- Renormierungsbedingungen, 73–74, 92
- Renormierungsgruppe (RG), 67
- Renormierungsgruppen-Gleichungen, 91–94
 - Integration der RGG, 187–188
- Resonanzplateau, 152
- Rotationssymmetrie
 - Verletzung der Rot., 32, 109–110
- Runge-Kutta-Verfahren, 187–188
- Sattelpunktentwicklung, 70–72, 175–176
- Schleifenentwicklung,
 siehe Störungstheorie
- Schrödingergleichung, 119, 121
- Simulationsparameter,
 siehe Parametereinstellungen
- Skalenbereich, 34
- Skalengesetze, 34, 94–98
- Skalenverletzungen, 30–35
- Spektralzerlegung, 140
- Spontane Symmetriebrechung, 19–21
- Störungstheorie
 - chirale Störungstheorie, 53–58, 60–66, 78
 - renormierte Störungstheorie, 72–73, 78, 129, 165
- Standard-Modell, 17–18
- Standard-Wirkung, 28–30
- stochastischer Prozeß, 38
- Streuamplitude, 128
- Streulänge, 130, 154–156
- Streuphasen
 - Isospin-0-Streuphase δ_0^0 , 161–169
 - Isospin-2-Streuphase δ_0^2 , 161–166
 - störungstheoretische Vorhersagen, 129, 166
- Suszeptibilität, 51
- Swendsen-Wang-Algorithmus, 40, 42, 171–173
- Symmetrie-Wirkung, 28, 30–32,
 siehe Wirkungen
- symmetrische Phase, 30, 34
- Thermodynamischer Limes, 27, 53, 56, 63, 186
- Trivialität, 22–23, 102–104
- Trivialitätsschranke, 10, 22, 111
- Übergangswahrscheinlichkeit, 37
- u -Entwicklung, 63
- unitäre Eichung, 20
- Unitaritätsschranke, 22
- Universalität, 25, 35, 67
- Vakuumpolarisationen,
 siehe Polarisisationseffekte

- Vektorisierung, 44, 143
- v -Entwicklung, 64
- verbesserte Wirkungen, 30–32
- Vereinheitlichte Theorien, 17
- Volumenabhängigkeiten, 53–84, 117,
126, 154–155
- Wahrscheinlichkeitsverteilung, 44–47
- Ward–Takahashi–Identitäten, 62
- Wechselwirkungen
 - elektroschwache Wechselwirkung,
17–21
 - schwache Wechselwirkung, 17
 - starke Wechselwirkung, 17–18,
siehe QCD
- Wellenfunktionen, 138–139, 153–154
- Wellenfunktions–Renormierungs–
konstante Z , 74
- Wirkungen
 - Standard–Wirkung, 28–30
 - Symanzik–Wirkung, 28, 30–32
 - verbesserte Wirkungen, 30–32
- Wirkungsquerschnitt, 105–108
- Wolff–Algorithmus, 40, 171,
siehe Clusteralgorithmus
- Yukawa–Modelle, 21
- Zeitausdehnung T , 132
- Zerfallsbreite, 129, 151, 165–169
- Zetafunktion, 132, 189–192
- Zufallszahlen, 143
- Zustandsintegral, 41, 45, 55–61, 64, 68
- 2–Teilchen–Zustände, 138–154
- zylindrisches Gitter, 142,
siehe Gitter

Verzeichnis der Tabellen

5.1	Ergebnisse für die Standard-Wirkung	88
5.2	Ergebnisse für die <i>verbesserte</i> Wirkung	89
6.1	Fit-Ergebnisse aus der Analyse des Skalenverhaltens	95
6.2	Vergleich der analytischen Ergebnisse von Lüscher und Weisz mit den Daten aus dieser numerischen Simulation	98
7.1	Numerische Ergebnisse für die Konstante C und den β_1 -Koeffizienten der β -Funktion	102
8.1	Gitterausdehnungen L , bei denen das 2-Teilchen-Energiespektrum ein Energieniveau im Resonanzbereich besitzt	131
8.2	Tatsächlich realisierte Simulationsparameter (κ, J) und Gittergrößen $L^3 \cdot T$	131
9.1	Gemessene Ein-Teilchen-Energien und ihre Abweichungen von der re- lativistischen Kontinuumsdispersionsrelation	135
9.2	Die Stammdaten für $m_\pi, \Sigma, Z, g_R, m_\sigma$ für die einzelnen Simulations- punkte (κ, J) , mit deren Hilfe die Streuphasen störungstheoretisch berechnet werden können.	137
9.3	Anzahl der Iterationen für die einzelnen Simulationsläufe	143
9.4	Das 2-Teilchen-Energiespektrum im Vergleichstest der unterschiedli- chen Analysemethoden	149
9.5	Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum für $\kappa = 0.310$ und $J = 0.005$	157
9.6	Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum für $\kappa = 0.315$ und $J = 0.010$	158
9.7	Das 2-Teilchen-Energie-Spektrum für $\kappa = 0.320$ und $J = 0.020$	159
10.1	Ergebnisse für die Resonanzmasse m_σ , die Kopplung g_R und die Zer- fallsbreite Γ_σ des σ -Teilchens	167
C.1	Werte der Entwicklungskoeffizienten β_i der Funktionen $\bar{g}_r(y)$	182
E.1	Werte der subtrahierten Zetafunktion $Z_{00}(1; j)$	191
E.2	Nullstellen der Zetafunktion $Z_{00}(1; j)$	192

1. The first part of the document is a letter from the President of the United States to the Congress, dated January 3, 1862.

2. The second part is a report from the Secretary of the Treasury, dated January 3, 1862.

3. The third part is a report from the Secretary of the Interior, dated January 3, 1862.

4. The fourth part is a report from the Secretary of the Navy, dated January 3, 1862.

5. The fifth part is a report from the Secretary of the War, dated January 3, 1862.

6. The sixth part is a report from the Secretary of the State, dated January 3, 1862.

7. The seventh part is a report from the Secretary of the Army, dated January 3, 1862.

8. The eighth part is a report from the Secretary of the Marine Corps, dated January 3, 1862.

9. The ninth part is a report from the Secretary of the Cavalry, dated January 3, 1862.

10. The tenth part is a report from the Secretary of the Artillery, dated January 3, 1862.

11. The eleventh part is a report from the Secretary of the Engineers, dated January 3, 1862.

12. The twelfth part is a report from the Secretary of the Ordnance, dated January 3, 1862.

13. The thirteenth part is a report from the Secretary of the Quartermaster, dated January 3, 1862.

14. The fourteenth part is a report from the Secretary of the Commissary, dated January 3, 1862.

15. The fifteenth part is a report from the Secretary of the Medical Department, dated January 3, 1862.

16. The sixteenth part is a report from the Secretary of the Adjutant General, dated January 3, 1862.

17. The seventeenth part is a report from the Secretary of the Provost Marshal, dated January 3, 1862.

Verzeichnis der Abbildungen

3.1	Phasendiagramm der 4dimensionalen $O(4)$ -symmetrischen Φ^4 -Theorie	33
4.1	Verteilungen der Energie für $L=16$ im Fall der Standard-Wirkung . .	49
4.2	Normierte Verteilungen der Länge der Magnetisierung und einer Komponente für $L=16$ im Fall der Standard-Wirkung	50
4.3	Die Magnetisierung und die Suszeptibilität für alle untersuchten Gittervolumina als Funktionen von κ	52
5.1	Das eingeschränkte effektive Potential $U(M)$ für $L=16$ im Fall der Standard-Wirkung	57
5.2	Beispiel für ein effektives Potential	58
5.3	Linien konstanter Massenverhältnisse m_σ/m_π und $m_\pi L$ in der κ - j Ebene	59
5.4	Die Funktionen $B_1(mL)$ und $B_2(mL)$	76
5.5	Die Funktion $B_3(mL)$	77
5.6	Die Magnetisierung als Funktion von $1/L^2$ bei $\kappa=0.308$ bzw. $\kappa=0.340$.	80
5.7	Die Suszeptibilität χ als Funktion von $1/L^2$ bei $\kappa=0.308$ bzw. $\kappa=0.340$.	83
5.8	Der Vergleich zwischen renormierter und chiraler Störungstheorie . .	85
6.1	Das Quadrat des Felderwartungswertes Σ als Funktion von κ für die Standard- bzw. die verbesserte Wirkung	96
6.2	Das Quadrat der σ -Masse als Funktion von κ für die Standard- bzw. die verbesserte Wirkung	97
7.1	Der Quotient m_σ/F für die Standard- und die verbesserte Wirkung im Vergleich mit den Resultaten von Lüscher und Weisz	103
7.2	Der Quotient von Kontinuums- und Gitterdispersionsrelation für die Standard- und die verbesserte Wirkung.	107
7.3	Die Abweichung δ_Ω zwischen dem differentiellen Gitter- und dem differentiellen Kontinuums-Wirkungsquerschnitt als Funktion der renormierten Masse m_R	108
8.1	Das freie 2-Teilchen-Energie-Spektrum	118
8.2	Die Funktionen $\phi(q)$ sowie $\nu\pi - \delta_0(k_\nu)$ ($\nu=0, 1, 2, \dots$) und die graphische Lösung der Gleichung (8.20) für festes L	125
8.3	Ein störungstheoretisch vorhergesagtes 2-Teilchen-Energie-Spektrum	130
9.1	Das gemessene 1-Teilchen-Energie-Spektrum im Vergleich zur Gitter- bzw. zur Kontinuums-Dispersionsrelation	134

9.2	Fits an die inversen Propagatoren im Impulsraum	136
9.3	Der dynamisch angepaßte Fit an die Eigenwerte der Korrelationsfunktionsmatrix	147
9.4	Vergleich von gemessenem und störungstheoretisch vorhergesagtem 2-Teilchen-Energie-Spektrum im Isospin-0-Kanal	150
9.5	Vergleich von gemessenem und störungstheoretisch vorhergesagtem 2-Teilchen-Energie-Spektrum im Isospin-2-Kanal	151
9.6	Die Eigenvektoren im Isospin-0-Kanal für Ebene Wellen	152
9.7	Die Eigenvektoren im Isospin-0-Kanal für die Lüscher'schen Wellenfunktionen	153
9.8	Alle Daten zu den niedrigsten 2-Teilchen-Energieniveaus auf einen Blick	156
9.9	Alle Daten zu den 2-Teilchen-Energiespektren auf einen Blick	160
10.1	Die Funktion $-\phi(kL/2\pi)$ in Abhängigkeit von k/m_π für jeweils einen festgehaltenen Wert von $m_\pi L$ bei ($\kappa=0.315$, $J=0.01$) und die Gitter mit $L=16, 20, 24$ und 32	163
10.2	Die Gittereffekte der Streuphasen zum Isospin 0 und 2	164
10.3	Vergleich zwischen störungstheoretisch vorhergesagter und numerisch berechneter Isospin-0-Streuphase	165
10.4	Alle Daten zu den Streuphasen auf einen Blick	168
C.1	Die Funktionen $\bar{g}_1(mL)$ und $\bar{g}_2(mL)$	183
C.2	Die Funktion $\bar{g}_3(mL)$	184
E.1	Die Zeta-Funktion $Z_{00}(1; q^2)$	190

Verzeichnis der Diagramme

A	Die bekannten fermionischen Materieteilchen	18
B	Unterschiedliche Methoden zur Erklärung der Volumeneffekte	60
C	Unterschiedliche Strategien zur Blockmittelung bei der Bestimmung des 2-Teilchen-Energiespektrums und Variationen	146
D	Thermodynamischer Limes und Kontinuums-limes	186

Danksagung

Während der Entstehungsphase dieser Arbeit habe ich vom Wissen und Zuspruch vieler Menschen profitiert. Für ihre Unterstützung und Hilfsbereitschaft möchte ich ihnen an dieser Stelle meinen aufrichtigen Dank aussprechen.

Mein ganz besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Prof. Hans A. Kastrup für seine umsichtige Betreuung und freundliche Unterstützung, die er mir in den vergangenen fünf Jahren unserer Zusammenarbeit hat zuteil werden lassen. Die familiäre offene Art, mit der er seinen Lehrstuhl leitet, die angenehme Arbeitsatmosphäre und die Förderung von selbständigem wissenschaftlichen Arbeiten kamen meinen Neigungen sehr entgegen. Ihm verdanke ich auch die Besuche bei internationalen Schulen auf Elba, in Cambridge und in Schladming sowie die Teilnahme bei den Gitter-Konferenzen in Japan und Amsterdam, bei denen ich die Ergebnisse dieser Arbeit vorstellen konnte.

Herzlicher Dank gebührt auch Prof. Jiří Jersák für die Übernahme des Korreferats dieser Arbeit. Von dem freundschaftlichen und kollegialen Verhältnis zu seinen Mitarbeitern und seinem ständigen Bemühen um internationale Kontakte konnte nicht zuletzt auch ich profitieren.

Dr. Meinulf Göckeler und Dr. Thomas Neuhaus danke ich für die langjährige hervorragende Zusammenarbeit in unseren gemeinsamen Projekten. Während dieser Zeit konnte ich viel von Meinulfs Erfahrungen nicht nur im Umgang mit analytischen Rechenmethoden lernen. Thomas sei herzlichst dafür gedankt, daß er mir bereitwillig seine Programme zur Verfügung gestellt hat. Bei ihm fand ich auch gastfreundliche Aufnahme während meiner Besuche in Bielefeld.

Dem jüngsten Mitglied unserer Kollaboration, Jörg Westphalen, für den die Beschäftigung mit Streuphasen zum Thema seiner Diplomarbeit geworden ist, kann ich nicht genug für die gemeinsame Arbeit am Simulations- und Analyseprogramm und die wertvollen Diskussionen danken.

Bei einem Besuch in Hamburg gab mir Prof. Martin Lüscher wesentliche Anregungen für das Fortschreiten des zweiten Teils der Arbeit. Der Fundus seiner Veröffentlichungen und die Bereitstellung seiner persönlichen Aufzeichnungen waren von unschätzbarem Wert für die Lösung wichtiger Probleme im Zusammenhang mit der Messung der Streuphasen und des instabilen σ -Teilchens.

Prof. Christian Lang und seinen Mitarbeitern aus Graz danke ich für den angenehmen Aufenthalt bei den Kernphysikwochen in Schladming und den dort praktizierten regen Gedankenaustausch.

Meiner Freundin Birgitta Wagner und meinem Freund und Mitbewohner Christoph Frick danke ich für ihre unermüdliche Hilfsbereitschaft und aufopfernde Fürsorge. Sie waren und sind meine Anspruchs- und Diskussionspartner in allen Lebenslagen.

Bei meinen KollegInnen Arifa Ali Khan, Dr. Thomas Trappenberg, Dr. Wolfgang Bock, Frank Brandstaeter, Wulf Böttger und Michael Ringe möchte ich mich für viele interessante Gespräche und gelegentliche Gefälligkeiten bedanken. Besonders Christoph, Arifa und Jörg sage ich ein herzliches Dankeschön für die Durchsicht des Manuskripts. Die gemeinsamen Teestunden mit Andre Reisen, Thomas Thiemann, Hendrik Botterweck, Ulrich Ruppel und Henning Wissowski gaben mir fruchtbare Einblicke in die Hamilton-Jacobi-Theorie und die Quantentheorie der Gravitation. Die aufschlußreichen Diskussionen mit ihnen und den anderen E'lern, hier seien nur Erich Focht, Ralf Altmeyer, Dr. Klaus-Dieter Born, Dr. Michael Spira und Wolfgang Franzki genannt, habe ich sehr genossen.

Den Mitarbeitern des Zentralinstituts für Angewandte Mathematik ZAM und des Höchstleistungsrechenzentrums HLRZ im Forschungszentrum Jülich möchte ich meinen Dank für die engagierte Unterstützung bei der Bedienung der CRAY Y-MP/8-32 und der IBM ES/9000 aussprechen. Insbesondere danke ich Martina Kamps für ihre freundliche Hilfe beim Umgang mit den SUN-Workstations des HLRZ. Dem Rechenzentrum der RWTH Aachen, namentlich den Herren W. Heinrich, V. Bartussek, Dr. K. Brühl und D. an Mey bin ich für ihre Hilfestellungen bei der Handhabung des Landesvektorrechners Fujitsu/Siemens-Nixdorf SNI S600/20 dankbar.

Ganz besonders am Herzen liegt mir der Dank an Sonya Chang. Ihre aufmunternden Worte und die gemeinsamen Gespräche jenseits der Physik boten häufig willkommene Unterbrechungen im täglichen Einerlei. Frau L. Gerken und Prof. Müller-Krumbhaar danke ich für die freundliche Aufnahme bei meinem neuen Arbeitgeber, dem Institut für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich.

Meiner Familie und auch meinen Freundinnen und Freunden möchte ich für ihre stetige Aufmunterung und menschliche Zuneigung ganz herzlich „Danke“ sagen.

JÜI-2781

Juni 1993

ISSN 0944-2952